



**Universidade Federal de Uberlândia
Faculdade de Engenharia Mecânica**

**Modelagem Matemática e Computacional
de Escoamentos Bifásicos Densos**

Saulo Andrade Pinto

**Uberlândia-MG
2025**

Saulo Andrade Pinto

Modelagem Matemática e Computacional de Escoamentos Bifásicos Densos

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Uberlândia, como parte dos requisitos para a obtenção do título de **MESTRE EM
ENGENHARIA MECÂNICA**.

Área de concentração: Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos

Orientador: Prof. Dr. João Marcelo Vedovotto

**Uberlândia-MG
2025**



**Universidade Federal de Uberlândia
Faculdade de Engenharia Mecânica**

Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica

A banca examinadora, conforme abaixo assinado, certifica a adequação desta dissertação para obtenção do título de mestre em Engenharia Mecânica.

Uberlândia, ____ de _____ de 20____

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. João Marcelo Vedovotto

Dr

....

**Uberlândia-MG
2025**

Dedico este trabalho a todos que acreditaram e me apoiaram durante esta trajetória.

AGRADECIMENTOS

"Não terei medo.

O medo mata a mente.

O medo é a pequena morte que leva à aniquilação total.

Enfrentarei meu medo.

Permitirei que passe por cima e me atravesse.

*E, quando tiver passado,
voltarei o olho interior para ver seu rastro.*

*Onde o medo não estiver mais,
nada haverá.*

Somente eu restarei."

(“Ladainha contra o medo” - Frank Hebert, Duna)

RESUMO

Palavras-chave:

ABSTRACT

Keywords:

LISTA DE FIGURAS

3.1	Geometria do reator de leito fluidizado. Retirado de [9].	3
3.2	Retirado de [9].	6
3.3	Retirado de [18].	21
4.1	Representação esquemática da configuração experimental do PIV.	25
4.2	Velocidade média do campo euleriano comparado com o resultado do experimento material de [4].	28
4.3	Desvio padrão do campo da flutuação da velocidade euleriana na direção z, comparado com o resultado do experimento material de [4].	29
4.4	Desvio padrão do campo da flutuação da velocidade euleriana na direção x, comparado com o resultado do experimento material de [4].	29
4.5	Energia cinética turbulenta do campo de flutuação de velocidade euleriana, comparado com o resultado do experimento material de [4].	30
4.6	Comparado com o resultado do experimento material de [4].	31
4.7	Velocidade média do campo euleriano comparado com o resultado do experimento material de [4].	32
4.8	Desvio padrão do campo da flutuação da velocidade euleriana na direção z, comparado com o resultado do experimento material de [4].	33
4.9	Desvio padrão do campo da flutuação da velocidade euleriana na direção x, comparado com o resultado do experimento material de [4].	33
4.10	Energia cinética turbulenta do campo de flutuação de velocidade euleriana, comparado com o resultado do experimento material de [4].	34

LISTA DE TABELAS

3.1	Pine wood properties (Song <i>et al.</i> , 2012)	7
3.2	Heterogeneous reaction constants.	8
3.3	Reações químicas homogêneas e suas taxas de reação.	10
3.4	Modelos computacionais.	10
3.5	Pine wood properties [13].	11
3.6	Reações homogêneas e heterogêneas consideradas na combustão e gaseificação de biomassa. Nota: $C_{(s)}$ is solid phase char. C_k represents molar concentration of gas species k	17
4.1	Visão geral das configurações experimentais.	25
4.2	Modelos de fechamento da turbulência que foram simulados.	28
4.3	Acoplamento pressão-velocidade e modelos de discretização.	30
4.4	Parâmetros de controle das fases.	31
4.5	Modelos de fechamento da turbulência que foram simulados.	32
4.6	Comparativo de grandezas características de Kolmogorov e Taylor	34
4.7	Análise de Malha	35

SUMÁRIO

1	Introdução	1
2	Objetivos	2
3	Fundamentação Teórica	3
3.1	Artigo Capecelatro e Desjardins (2013)[1]	3
3.2	Artigo Ku <i>et al.</i> (2015) [9]	3
3.2.1	Modelo Físico	3
3.2.2	Modelagem matemática	3
3.2.3	Modelagem Computacional	10
3.3	Artigo Evrard <i>et al.</i> (2019) [5]	11
3.3.1	Modelagem da dinâmica da interface gás/líquido	11
3.3.2	Modelagem da mistura gás-gotículas	12
3.4	Artigo Yang <i>et al.</i> (2022) [18]	14
3.4.1	Formulação matemática	14
3.4.2	Termos fontes para interação partícula/gás	19
3.4.3	Redistribuição espacial de parcelas e termos fonte	20
3.5	Artigo Kurose <i>et al.</i> 2022 [17]	22
3.5.1	Modelo Físico	23
3.5.2	Modelo Matemático	23
4	Metodologia	24
4.1	COLUNA DE BOLHAS	24
4.1.1	Modelagem [2]	25
4.1.2	Resultados ([2])	27
4.1.3	Modelagem	30
4.1.4	Resultados	32
4.1.5	Conclusão	33
4.2	QUEIMADOR DE SPRAY COM AGULHA PILOTADA DE SYDNEY	34
5	Resultados	36
6	Conclusões	37
	Referências Bibliográficas	38

1. INTRODUÇÃO

2. OBJETIVOS

3. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

3.1 ARTIGO CAPECELATRO E DESJARDINS (2013)[1]

3.2 ARTIGO KU ET AL. (2015) [9]

3.2.1 MODELO FÍSICO

Neste modelo é considerado partículas de areia e de biomassa. Na qual a areia é um elemento inerte.

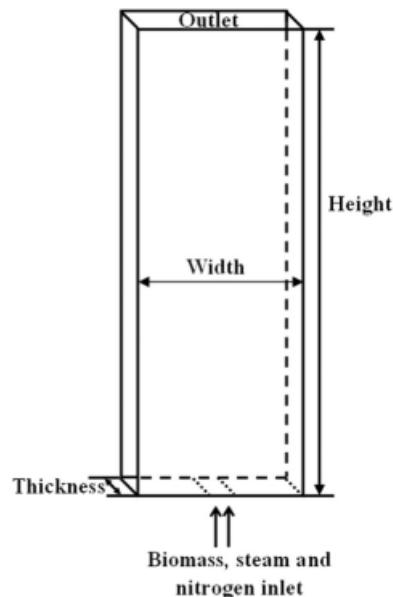


Figura 3.1: Geometria do reator de leito fluidizado. Retirado de [9].

Na Fig. 3.1, mostra-se o esboço da geometria . O recipiente retangular possui largura de 0,23 m, altura de 1,5 m e espessura de 0,0015 m, com um orifício de 0,01 m de largura no centro da parede inferior.

3.2.2 MODELAGEM MATEMÁTICA

O modelo CFD-DEM é formulado com base em um modelo multifásico Euleriano-Lagrangiano de estado instável, o que significa que as equações de transporte são resolvidas

para a fase contínua e cada uma das partículas é rastreada através do campo gasoso calculado. A interação entre a fase contínua e a fase discreta é levada em consideração ao tratar a troca de massa, quantidade de movimento linear e energia entre os dois sistemas como termos fonte nas equações de balanço. Especificamente, os mecanismos de troca de massa e energia são adotados do trabalho de Kumar e Ghoniem (2012)[10] com certas modificações, conforme será descrito abaixo. Além disso, para a troca de quantidade de movimento linear, questões detalhadas de implementação estão disponíveis em Ku *et al.* (2013)[8].

FASE DE PARTÍCULAS DISCRETAS

A fase de partículas discretas consiste em areia e partículas de biomassa que são modelados de forma Lagrangiana. A areia desempenha apenas o papel de transportador de energia térmica na gaseificação da biomassa sem participar de nenhuma reação, enquanto a biomassa passa por sucessivos processos físicos e químicos, como aquecimento, secagem, pirólise e gaseificação, e seu comportamento está fortemente relacionado às condições de operação.

MOVIMENTO DAS PARTÍCULAS

As equações de balanço de massa (Eq. 3.1), quantidade de movimento linear (Eq. 3.2-3.7), energia (Eq. 3.8) são descritas abaixo.

$$\frac{dm_p}{dt} = \frac{dm_{vapor}}{dt} + \frac{dm_{devol}}{dt} + \frac{dm_{C-CO_2}}{dt} + \frac{dm_{C-H_2O}}{dt} \quad (3.1)$$

$$m_p \frac{d\mathbf{v}_p}{dt} = \mathbf{f}_g + \mathbf{f}_c + m_p \mathbf{g} \quad (3.2)$$

$$I_p \frac{d\mathbf{w}_p}{dt} = \mathbf{T}_p \quad (3.3)$$

$$\mathbf{f}_g = \frac{V_p \beta}{\varepsilon_p} (\mathbf{u}_g - \mathbf{v}_p) \quad (3.4)$$

$$\beta = \begin{cases} 150 \frac{\varepsilon_g^2 \mu_g}{\varepsilon_g^2 d_p^2} + 1,75 \frac{\varepsilon_p \rho_p}{\varepsilon_g d_p} |\mathbf{u}_g - \mathbf{v}_p| & \varepsilon_g < 0,8 \\ \frac{3}{4} C_d \frac{\varepsilon_p \rho_g}{d_p} |\mathbf{u}_g - \mathbf{v}_p| \varepsilon_g^{-2,65} & \varepsilon_g \geq 0,8 \end{cases} \quad (3.5)$$

$$C_d = \begin{cases} \frac{24}{Re_p} (1 + 0,15 Re_p^{0,687}) & Re_p < 1000 \\ 0,44 & Re_p \geq 1000 \end{cases} \quad (3.6)$$

$$Re_p = \varepsilon_g \rho_g d_p |\mathbf{u}_g - \mathbf{v}_p| / \mu_g \quad (3.7)$$

$$m_p c_p \frac{dT_p}{dt} = h A_p (T_g - T_p) + \frac{e_p A_p}{4} (G - 4\sigma T_p^4) + Q_p \quad (3.8)$$

Conforme mostrado na Eq. 3.2, \mathbf{f}_c , ou seja, a força de contato total atuando na partícula

devido a colisões entre as partículas ou partículas-parede, é levada em consideração e é necessária para fluxos densos de gás-partícula. Isso é diferente do modelo de Kumar e Ghoniem (2012)[10] que não considera as forças de contato e , portanto, seu modelo é apenas aplicável a sistemas multifásicos diluídos.

Neste artigo, o coeficiente de troca de quantidade de movimento linear interfásico β é modelado por meio da conhecida correlação de arrasto de Gidaspow (Gidaspow, 1994[6]). Conforme mostrado na Eq. 3.5, o modelo de Gidaspow combina as correlações de Ergun (1952) e Wen e Yu (1966) para o regime granular diluído e denso, onde uma porosidade ε_g de 0,8 é adotada como o limite entre esses dois regimes. Este modelo é frequentemente usado na literatura e os efeitos do uso de diferentes modelos de arrasto foram discutidos na publicação de Ku *et al.* (2013).

Na Eq. 3.8 tem-se a temperatura da partícula calculada levando em consideração a transferência de energia térmica devido à convecção, radiação e termo fonte Q_p , incluindo tanto o calor latente de vaporização da água da partícula para a fase gasosa quanto o calor gerado pelas reações heterogêneas de carvão.

As colisões entre partículas ou partículas-parede são resolvidas por um método de elementos discretos de esfera macia que foi proposto primeiramente por Cundall e Strack (1979). Neste método, as forças de contato entre partículas são calculadas usando elementos mecânicos simples equivalentes, como mola, controle deslizante e amortecedor, ilustrado na Fig. 3.2. As partículas podem se sobrepor levemente. A força normal que tende a repelir as partículas pode ser deduzida dessa sobreposição espacial e da velocidade relativa normal no ponto de contato. A rigidez da mola pode ser calculada pela teoria de contato hertziana quando as propriedades físicas como o módulo de Young e a razão de Poisson são conhecidas. Uma característica do modelo de esfera macia é que ele é capaz de lidar com múltiplos contatos partícula-partícula, o que é de muita importância ao modelar sistemas de partículas densas como leito fluidizado. Problemas detalhados de implementação do modelo de esfera macia estão disponíveis na literatura (por exemplo, Tsuji *et al.*, 1992). Neste estudo, as seguintes propriedades físicas são adotadas para o modelo de colisão: O módulo de Young é 5×10^6 Pa; a razão de Poisson é 0,3; o coeficiente de restituição e o coeficiente de atrito são 0,9 e 0,3, respectivamente. Todos os valores são igualmente válidos para paredes e partículas (Bruchmuller *et al.*, 2013).

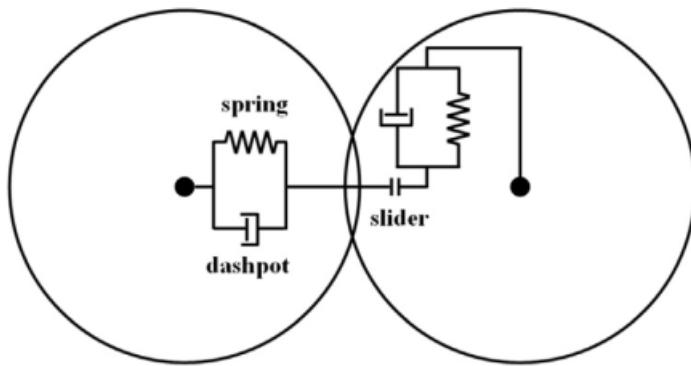
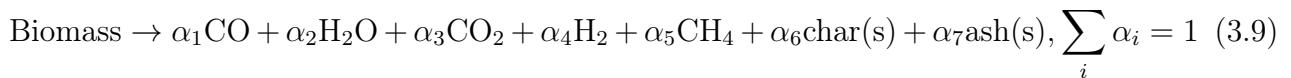


Fig. 1. The spring–slider–dashpot collision model.

Figura 3.2: Retirado de [9].

PIRÓLISE

Assim que a biomassa fresca é introduzida no fundo do leito de areia quente, ela é imediatamente aquecida e, portanto, ocorre a desvolatilização e pirólise da biomassa, bem como a gaseificação do carvão. As composições de pirólise liberadas da biomassa podem ser expressas pela seguinte equação de equilíbrio e cada rendimento do produto é resolvido com a ajuda da análise de conservação elementar.



Note que, no modelo atual, as reações com enxofre e nitrogênio não são levadas em conta devido à sua pequena quantidade (Tabela 3.1), e são consideradas passando diretamente para cinzas. CH₄ é a única espécie de hidrocarboneto levada em consideração. Embora C₂H₂, C₂H₄, C₂H₆ e outros hidrocarbonetos superiores (alcatrão) sejam produzidos no processo de pirólise, eles são tratados como produtos não estáveis e esses mecanismos também têm sido amplamente utilizados por outros pesquisadores (Ergudenler *et al.*, 1997; Gerber *et al.*, 2010). Consistente com o trabalho de Abani e Ghoniem (2013), a taxa de desvolatilização é modelada usando uma única reação de Arrhenius de primeira ordem, dada pela Eq. 3.10.

$$\frac{dm_{devol}}{dt} = A \exp\left(-\frac{E}{RT_p}\right) m_{devol} \quad (3.10)$$

Onde m_{devol} é a massa dos voláteis restantes na partícula, $A = 5,0 \times 10^6 \text{s}^{-1}$, e $E = 1,2 \times 10^8 \text{J/kmol}$ (Prakash e Karunamithi, 2008). O processo de desvolatilização é considerado energeticamente neutro porque o calor da desvolatilização é geralmente desprezível em comparação ao calor das reações devido às reações de consumo de carvão (Abani e Ghoniem, 2013).

Tabela 3.1: Pine wood properties (Song *et al.*, 2012).

Proximate analysis (wt%, on the as-received basis)		Elemental analysis (wt%, on the daf basis)	
Moisture	11.89	C	46.29
Ash	1.56	H	6.48
Volatile	71.78	O	46.08
Fixed carbon	14.77	N&S	1.15

QUÍMICA E CONVERSÃO DE CARVÃO

Após a desvolatização, a partícula de biomassa é deixada com carvão e cinzas. Assume-se que as cinzas são transportadas junto com a partícula sem participar de nenhuma reação. O carvão reagirá na presença de dióxido de carbono e vapor e será convertido em monóxido de carbono e hidrogênio. As seguintes reações heterogêneas são assumidas e implementadas no OpenFOAM.



As reações 3.11 e 3.12 são reações de gaseificação endotérmica e 3.11 é conhecida como reação de Boudoard.

A taxa de consumo de carvão que inclui os efeitos de ambas as taxas de difusão e cinética é dada como

$$\frac{dm_{C-i}}{dt} = -A_p p_i \frac{r_{diff,i} r_{kin,i}}{r_{diff,i} + r_{kin,i}} \quad (3.13)$$

$$r_{diff,i} = C_i \frac{[(T_p + T_g)/2]^{0.75}}{d_p} \quad (3.14)$$

$$r_{kin,i} = A_i T_p \exp \left(-\frac{E_i}{RT_p} \right) \quad (3.15)$$

Onde m_{C-i} é a massa do carvão restante na partícula quando o carvão reage com espécies gaseificantes i ($= \text{CO}_2$, ou H_2O), p_i é a pressão parcial das espécies gaseificantes, $r_{diff,i}$ e $r_{kin,i}$ são a taxa de difusão e a taxa cinética, respectivamente. C_i é a constante da taxa de difusão de massa. A_i e E_i são os parâmetros típicos das formas de Arrhenius das taxas cinéticas. Para a biomassa de madeira considerada no presente estudo, as constantes usadas para as taxas cinéticas e de difusão são monstadas na Tabela 3.2 (Abani e Ghoniem, 2013).

ENCOLHIMENTO DE PARTÍCULAS

A química do carvão-gás consome os sólidos e as partículas de biomassa encolhem conforme reagem com a fase gasosa. A contração de partículas não só tem um efeito na gaseificação,

Tabela 3.2: Heterogeneous reaction constants.

Parameters	Values
A_{H_2O} (s/(m K))	45,6
E_{H_2O} (J/kmol)	$4,37 \times 10^7$
A_{CO_2} (s/(m K))	8,3
E_{CO_2} (J/kmol)	$4,37 \times 10^7$
C_i ($i = H_2O, CO_2$) (s/K ^{0.75})	$5,0 \times 10^{-12}$

mas também afeta fortemente a trajetória das partículas em seu caminho para fora do reator. SEM a contração de partículas, o arrastamento de carvão será altamente superestimado. Aqui, assumimos que a densidade de partículas (ρ_p) permanece constante durante todo o processo de gaseificação e uma contração proporcional à massa é adotada para cada partícula de biomassa. Assim, o diâmetro da partícula de biomassa encolhe de acordo com a Eq. 3.16 (Bruchmuller et al., 2012).

$$d_p = \left(\frac{6m_p}{\pi\rho_p} \right)^{1/3} \quad (3.16)$$

FASE GASOSA CONTÍNUA

A fase gasosa é modelada como contínua, conhecida como um modelo do tipo Euleriano.

MOVIMENTO DA FASE GASOSA

Para a fase gasosa contínua, as equações de massa, quantidade de movimento linear, energia e transporte de espécies que modelam podem ser tipicamente representadas pelas seguintes equações:

Massa:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_g \rho_g) + \nabla \cdot (\varepsilon_g \rho_g \mathbf{u}_g) = S_{p,m} \quad (3.17)$$

Quantidade de movimento linear:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_g \rho_g \mathbf{u}_g) + \nabla \cdot (\varepsilon_g \rho_g \mathbf{u}_g \mathbf{u}_g) = -\nabla p + \nabla \cdot (\varepsilon_g \boldsymbol{\tau}_{eff}) + \varepsilon_g \rho_g \mathbf{g} + S_{p,mom} \quad (3.18)$$

Energia:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_g \rho_g E) + \nabla \cdot (\varepsilon_g \mathbf{u}_g (\rho_g E + p)) = \nabla \cdot (\varepsilon_g \alpha_{eff} \nabla h_s) + S_h + S_{p,h} + S_{rad} \quad (3.19)$$

$$E = h_s - \frac{p}{\rho_g} + \frac{u_g^2}{2} \quad (3.20)$$

Especies:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_g \rho_g Y_i) + \nabla \cdot (\varepsilon_g \rho_g \mathbf{u}_g Y_i) = \nabla \cdot (\varepsilon_g \rho_g D_{eff} \nabla Y_i) + S_{p,Y_i} + S_{Y_i} \quad (3.21)$$

Note que as equações de balanço acima levaram em conta a fração de volume do gás ε_g e são aplicáveis ao fluxo denso e reativo de gás-partícula em leitos fluidizados estudado neste artigo. Elas são diferentes das de Kumas e Ghoniem (2012) que não consideram ε_g e são adequadas apenas para fluxos de gás-partícula muito diluídos.

Neste artigo, o tensor de tensão efetiva, $\boldsymbol{\tau}_{eff}$, é a soma das tensões viscosas e turbulentas. Da mesma forma, a difusividade térmica dinâmica efetiva α_{eff} e o coeficiente de difusão de massa para espécies D_{eff} levam em consideração tanto as contribuições viscosas quanto turbulentas. O modelo de radiação P-1 é adotado para resolver o termo fonte de radiação S_{rad} como geralmente foi escolhido em simulações de CFD de gaseificação de combustível pulverizado com espalhamento de radiação (Backreedy *et al.*, 2006).

Conforme mostrado pela Eq. 3.21, uma equação de transporte é resolvida para cada espécie de gás, e as propriedades totais da fase gasosa são calculadas a partir das frações de massa das espécies de gás que compõem a mistura de gases. A massa, quantidade de movimento linear e entalpia Eqs. 3.17, 3.18 e 3.19, respectivamente, são resolvidas em cada passo de tempo para a mistura de gases. O fluxo é compressível, e a pressão, volume, temperatura, e densidade da fase gasosa são relacionados por meio de equações de estado.

Para resolver a turbulência, as equações de balanço que regem para k e ε , que levam em conta a fração de volume do gás ε_g e são adequadas para nosso sistema de simulação de gás denso-partícula, são as seguintes (Kumas e Ghoniem, 2012, Wang *et al.*, 2009),

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_g \rho_g k) + \nabla \cdot (\varepsilon_g \rho_g \mathbf{u}_g k) = \nabla \cdot \left(\varepsilon_g \left(\mu_g + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \nabla k \right) + \varepsilon_g G_k - \varepsilon_g \rho_g \varepsilon \quad (3.22)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_g \rho_g \varepsilon) + \nabla \cdot (\varepsilon_g \rho_g \mathbf{u}_g \varepsilon) = \nabla \cdot \left(\varepsilon_g \left(\mu_g + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right) + \varepsilon_g \frac{\varepsilon}{k} (C_{\varepsilon 1} G_k - C_{\varepsilon 2} \rho_g \varepsilon) \quad (3.23)$$

As constantes $C_{\varepsilon 1} = 1,44$, $C_{\varepsilon 2} = 1,92$, $\sigma_k = 1,0$, e σ_ε . A viscosidade turbulenta μ_t é calculada como uma função de k e ε ,

$$\mu_t = \rho_g C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (3.24)$$

Onde C_μ é uma constante definida como 0,09.

REAÇÕES DA FASE GASOSA

Existem centenas de reações químicas em fase gasosa em um reator de gaseificação. Mesmo que todas as reações elementares e suas taxas de reação pudessem ser identificadas, não é possível calcular um número tão grande de reações acopladas. Para simplificar, um conjunto de 2 reações globais (3 reações considerando reação reserva) é usado para descrever as principais taxas de conversão no reator e o efeito da turbulência nas reações é resolvido pelo modelo de reator

parcialmente agitado (PaSR) (Abani e Ghoniem, 2013). As reações de reação química e suas taxas de reação, bem como as referências adotadas estão listadas na Tabela 3.3. A taxa de reação está em $\text{kmol}/(\text{m}^3\text{s})$, and $[\cdot]$ implica concentração molar $\text{kmol}/(\text{m}^3)$ das espécies gasosas entre colchetes. As reações R3 são o consumo de CH_4 por meio da reforma a vapor. A reação R4 é conhecida como reação de deslocamento reversível de água-gás. Ambas as taxas de reação direta k_f e a taxa de reação reversa k_b de R4 são calculadas em vez de uma taxa combinada direta-reversa e k_f e k_b são relacionados pela constante de equilíbrio $k_{eq} = k_f/k_b$.

Tabela 3.3: Reações químicas homogêneas e suas taxas de reação.

Reactions	Reaction rate	Refs
$\text{CH}_4 + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{CO} + 3\text{H}_2$ (R3)	$k = 3.0 \times 10^6 [\text{CH}_4][\text{H}_2\text{O}] \exp\left(-\frac{1.26 \times 10^9}{RT}\right)$	Jones and Lindstedt (1988)
$\text{CO} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{CO}_2 + \text{H}_2$ (R4)	$k_w = 2.78 \times 10^7 [\text{CO}][\text{H}_2\text{O}] \exp\left(-\frac{1.26 \times 10^7}{RT}\right)$	Gómez-Barca and Lechner (2010)
	$k_w = 9.59 \times 10^7 [\text{CO}_2][\text{H}_2] \exp\left(-\frac{4.66 \times 10^7}{RT}\right)$	
	$k_{eq} = 0.028 \exp\left(\frac{3.40 \times 10^7}{RT}\right)$	

3.2.3 MODELAGEM COMPUTACIONAL

Na Tabela 3.4 tem-se as informações referente aos métodos utilizadas para a simulação computacional.

Tabela 3.4: Modelos computacionais.

Informação	Descrição
Partículas discretas	Esquema de integração temporal de Euler de 1 ^a ordem
Colisões entre partículas/ partículas e paredes	Colisão de esferas macias (Tsuji <i>et al.</i> , 1992[16])
Temperatura, diâmetro, composição e capacidade térmica	Submodelos de secagem, pirólise e gaseificação
Fase gasosa contínua	Discretização temporal pelo esquema de Euler Discretização espacial por volumes finitos
Acoplamento entre as partículas discretas e a fase gasosa	Termos fontes $S_{p,m}$, $S_{p,mom}$, $S_{p,h}$ e $S_{p,Yi}$
Software e implementação	OpenFOAM e caixa de ferramentas em C++
Tempo de simulação	20 s

Os dados experimentais de um reator de leito fluidizado de biomassa em escala laboratorial foram extraídos de Song *et al.*(2012)[13].

O domínio computacional é composto pelas paredes, pelo orifício e a saída superior. Inicialmente o reator é preenchido completamente com N_2 e um leito de areia compacto composto por 40 000 partículas esféricas de areia com diâmetro de 1,5 mm. A temperatura inicial da areia e do gás no domínio é definida como igual à temperatura de operação do reator (T_r). Nas paredes são impostas condições de não escorregamento para a fase gasosa e a temperatura da parede é especificada de acordo com a temperatura operacional do reator. Na saída superior, a condição de contorno de pressão atmosférica é adotada e as partículas podem sair do domínio computacional durante a simulação, modelando um fenômeno de arraste de sólidos finos.

A biomassa é alimentada através do orifício inferior, juntamente com uma mistura de vapor e nitrogênio.

Tabela 3.5: Pine wood properties [13].

Proximate analysis (wt%, on the as-received basis)	Elemental analysis (wt%, on the daf basis)		
Moisture	11.89	C	46.29
Ash	1.56	H	6.48
Volatile	71.78	O	46.08
Fixed carbon	14.77	N&S	1.15

3.3 ARTIGO EVRARD ET AL. (2019) [5]

3.3.1 MODELAGEM DA DINÂMICA DA INTERFACE GÁS/LÍQUIDO

Esta seção descreve brevemente a estrutura Euleriana empregadas nos exemplos e casos de teste apresentados neste artigo. Um esquema de captura de interface de volume de fluido é usado para representar a interface gás/líquido, embora o uso de um método level-set ou acoplado VOF/level-set exigiria uma mudança mínima no procedimento de acoplamento descrito no restante do manuscrito.

EQUAÇÕES QUE MODELAM O ESCOAMENTO

As equações que modelam o escoamento neste artigo são as equações de balanço de massa e de quantidade de movimento linear para escoamento incompressível.

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (3.25)$$

$$\rho \left[\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) \right] = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \rho \mathbf{g} + \mathbf{f}_\sigma \quad (3.26)$$

Onde ρ é a massa específica do fluido, \mathbf{u} o vetor velocidade, p a pressão, e \mathbf{g} o campo gravitacional. O tensor de tensão deviatórico para um fluido newtoniano, $\boldsymbol{\tau}$, é dado por

$$\boldsymbol{\tau} = \mu(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T) \quad (3.27)$$

Onde μ é a viscosidade dinâmica do fluido, e a força de tensão interfacial \mathbf{f}_σ é definida como

$$\mathbf{f}_\sigma = \sigma \kappa \delta_\Gamma \mathbf{n} \quad (3.28)$$

Onde σ é o coeficiente de tensão interfacial, κ a curvatura da interface, \mathbf{n} o vetor normal da interface. Um método de volume de fluido (DeBar, 1974; Hirt e Nichols, 1981) é escolhido para capturar o movimento da interface: as fases de gás e líquido são então representadas implicitamente pela função indicadora $\chi : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ definida como

$$\chi(\mathbf{x}, t) = \begin{cases} 1 & \text{se } \mathbf{x} \in \text{fase líquida} \\ 0 & \text{se } \mathbf{x} \in \text{fase gasosa} \end{cases} \quad (3.29)$$

Isso resulta em um campo de função de cor discreta γ representando a fração de líquido em cada célula computacional K seguindo

$$\gamma_K = \frac{1}{V_K} \int_K \chi(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} \quad (3.30)$$

Onde V_K é o volume da célula K . A interface é advectada com base na equação de transporte

$$\frac{\partial \gamma}{\partial t} \mathbf{u} \nabla \gamma = 0 \quad (3.31)$$

Enquanto a massa específica e a viscosidade dinâmica do fluido são obtidas a partir das seguintes relações

$$\rho = \rho_l \gamma + \rho_g (1 - \gamma) \quad (3.32)$$

$$\mu = \mu_l \gamma + \mu_g (1 - \gamma) \quad (3.33)$$

Onde os subscritos g e l referem-se às respectivas propriedades do gás e do líquido.

CONSIDERAÇÕES DE IMPLEMENTAÇÃO

As Eqs. 3.25 e 3.26 são discretizadas usando volumes finitos com um arranjo de variáveis co-localizadas e resolvidas em um único sistema linear de equações acopladas, conforme apresentado em Denner e van Wachem (2014). A Eq. 3.31 de transporte é resolvida usando um método de advecção de reconstrução linear por partes Lagrangiana (van Wachem e Schouten, 2002), em associação com um método de avaliação de normais de interface Youngs-centrado misto (Aulisa *et al.*, 2007). Em relação à modelagem da força de tensão interfacial, o modelo de superfície contínua (CSF) (Brackbill *et al.*, 1992) é empregado: a função de densidade de interface é definida como $\delta_\Gamma = |\nabla \gamma|$, e a normal de interface como $\mathbf{n} = \nabla \gamma |\nabla \gamma|$. A força de interface \mathbf{f}_{sigma} então assume a forma volumétrica discreta

$$\mathbf{f}_\sigma = \sigma \kappa \nabla \gamma \quad (3.34)$$

3.3.2 MODELAGEM DA MISTURA GÁS-GOTÍCULAS

Partindo do pressuposto de que pequenas gotículas selecionadas permanecem esféricas durante toda a evolução do fluxo, elas podem ser consideradas como partículas indeformáveis cujo movimento é determinado pela segunda lei de Newton, enquanto o movimento do gás circundante é determinado pelas equações de Navier-Stokes. Uma abordagem baseada na édia local pode então ser empregada para modelar a mistura de gotículas de gás e líquido (ou partículas) (Anderson e Jackson, 1967; Drew, 1983; Jackson, 1997; Drew, 1983; Jackson, 1997; Capecelatro e Desjardins, 2013). Tal abordagem permite levar em conta o impacto das partículas no fluxo e vice-versa sem ter que resolver a interação fluido-partícula no comprimento das partículas.

Ela se baseia na definição de variáveis médias locais e fornece uma estrutura matemática sólida para a resolução numérica do movimento da mistura de gás-gotículas.

Esta seção aborda a filtragem das equações de fluxo e apresenta uma forma simplificada da segunda lei de Newton para o cálculo das trajetórias de partículas Lagrangianas. A escolha de um núcleo de filtragem e aspectos de suas implementações também são discutidos.

FRAÇÕES DE VOLUME DE FASE E DECOMPOSIÇÃO VARIÁVEL

A média local é obtida por meio de convolução com um núcleo de filtragem suave $g : \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}^+$, decrescente monotonicamente em \mathbb{R} , e que é normalizado de modo que

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_\infty} g(r) dV &= \int_{\varphi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{\pi} \int_{r=0}^{\infty} g(r) r^2 \sin\theta dr d\theta d\varphi \\ &= 4\pi \int_0^{\infty} g(r) r^2 dr = 1 \end{aligned} \quad (3.35)$$

Onde Ω_∞ é o espaço tridimensional (Anderson e Jackson, 1967). Embora não seja uma condição necessária para o resto da derivação, g é escolhido para ser compactamente suportado em uma esfera S_δ de raio δ . Usando a função indicadora de fase χ introduzida na Eq. 3.29 e assumindo, em uma primeira instância, que ela é definida em Ω_∞ , pode-se definir a fração de volume de gás local como

$$\varepsilon_g(\mathbf{x}, t) = \int_{\Omega_\infty} g(|\mathbf{x} - \mathbf{y}|)(1 - \chi(\mathbf{y}, t)) dV_y = \int_{\Omega_g(t)} g(|\mathbf{x} - \mathbf{y}|) dV_y \quad (3.36)$$

E a fração de volume do líquido local (ou gota) como

$$\varepsilon_l(\mathbf{x}, t) = \int_{\Omega_\infty} g(|\mathbf{x} - \mathbf{y}|)\chi(\mathbf{y}, t) dV_y = \int_{\Omega_l(t)} g(|\mathbf{x} - \mathbf{y}|) dV_y \quad (3.37)$$

dV_y sendo um elemento de volume infinitesimal centrado em \mathbf{y} . Os subconjuntos $\Omega_g(t)$ e $\Omega_l(t)$ representam respectivamente as porções Ω_∞ ocupadas pelas fases gasosa e líquida no tempo t , e $\Omega_g(t) \cup \Omega_l(t) = \Omega_\infty$. Devido à normalização de g , a seguinte equação é satisfeita em todos os lugares e em todos os momentos:

$$\varepsilon_g(\mathbf{x}, t) + \varepsilon_l(\mathbf{x}, t) = 1 \quad (3.38)$$

A filtragem de uma variável pontual ϕ da fase gasosa resulta em uma quantidade filtrada $\bar{\phi}$ tal que

$$\varepsilon_g(\mathbf{x}, t)\bar{\phi}(\mathbf{x}, t) = \int_{\Omega_g(t)} g(|\mathbf{x} - \mathbf{y}|)\phi(\mathbf{y}, t) dV_y \quad (3.39)$$

Da mesma forma, a filtragem de uma variável de ponto líquido ψ segue

$$\varepsilon_l(\mathbf{x}, t)\bar{\psi}(\mathbf{x}, t) = \int_{\Omega_l(t)} g(|\mathbf{x} - \mathbf{y}|)\psi(\mathbf{y}, t)dV_y \quad (3.40)$$

Uma variável pontual pode, portanto, ser decomposta em um componente filtrado (ou médio) e um componente de flutuação em torno de sua média, produzindo, por exemplo,

$$\phi(\mathbf{x}, t) = \bar{\phi}(\mathbf{x}, t) + \phi'(\mathbf{x}, t) \quad (3.41)$$

FILTRAGEM DAS EQUAÇÕES DE FLUXO

3.4 ARTIGO YANG ET AL. (2022) [18]

3.4.1 FORMULAÇÃO MATEMÁTICA

EQUAÇÕES PARA MODELAGEM DA FASE GASOSA

$$\frac{\partial (\alpha_g \bar{\rho}_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_g \bar{\rho}_g \tilde{\mathbf{u}}_g) = \bar{S}_m \quad (3.42)$$

Onde, $\overline{(\cdot)}$ denota a média de Reynolds, $\tilde{(\cdot)}$ denota a média de Frave, α_g é a fração volumétrica do gás, ρ_g é a densidade do gás, \mathbf{u}_g é o vetor de velocidade do gás e S_m representa a taxa de formação de gás devido à conversão termoquímica das partículas de combustível.

Em Eq. 3.43, tem-se a equação da quantidade de movimento linear.

$$\frac{\partial (\alpha_g \bar{\rho}_g \tilde{\mathbf{u}}_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_g \bar{\rho}_g \tilde{\mathbf{u}}_g \tilde{\mathbf{u}}_g) = \alpha_g \bar{\rho}_g \mathbf{g} - \alpha_g \nabla \bar{p}_g + \nabla \cdot (\alpha_g \bar{\tau}_g) + \overline{\mathbf{S}_u} \quad (3.43)$$

Onde \mathbf{g} é o campo gravitacional, p_g é a pressão do gás, τ_g é a soma da tensão viscosa e da tensão de Reynolds, e \mathbf{S}_u é o termo fonte devido a troca de quantidade de movimento linear entre o gás e a fase sólida.

A equação da energia é dada pela Eq. 3.44.

$$\begin{aligned} \frac{\partial (\alpha_g \bar{\rho}_g (\tilde{h} + \tilde{K}))}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_g \bar{\rho}_g \tilde{\mathbf{u}}_g (\tilde{h} + \tilde{K})) &= \alpha_g \bar{\rho}_g \tilde{\mathbf{u}}_g \cdot \mathbf{g} + \frac{\partial \alpha_g \bar{p}_g}{\partial t} \\ &+ \nabla \cdot (\alpha_g \bar{\rho}_g \Gamma_{eff} \nabla \tilde{h}) + \alpha_g \dot{Q}_r + \alpha_g \dot{Q}_{com} + \bar{S}_q \end{aligned} \quad (3.44)$$

Onde h é a entalpia específica, K é a energia cinética do fluxo de gás e Γ_{eff} é a soma dos coeficientes de difusão de calor molecular turbulento, $\Gamma_{eff} = \Gamma_g + \mu_t / (\bar{\rho}_g Pr_t)$, onde Pr_t é o número de Prandtl turbulento e μ_t é a viscosidade turbulenta. \dot{Q}_r é o termo fonte médio devido à transferência de energia térmica por radiação, \dot{Q}_{com} é o termo fonte devido às reações químicas voláteis e \bar{S}_q é o termo médio devido à conversão termoquímica do combustível sólido.

Na Eq. 3.45, tem-se a equação para o transporte das espécies.

$$\frac{\partial (\alpha_g \bar{\rho}_g \tilde{Y}_{g,k})}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_g \bar{\rho}_g \tilde{\mathbf{u}}_g \tilde{Y}_{g,k}) = \nabla \cdot (\alpha_g \bar{\rho}_g D_{eff} \nabla \tilde{Y}_{g,k}) + \alpha_g \bar{\omega}_{g,k} + \bar{S}_{Y_k} \quad (3.45)$$

Onde $Y_{g,k}$ é a fração de massa da espécie k na mistura de gases, e $\bar{\omega}_{g,k}$ é a taxa média de reação química da espécie k . D_{eff} é o coeficiente de defisão de massa efetivo para a espécie k levando em consideração as contribuições viscosa e turbulenta, $D_{eff} = D_g + \mu_t / (\bar{\rho}_g Sc_t)$, onde Sc_t é o número de Schmidt turbulento. \bar{S}_{Y_k} é a taxa média de formação da espécie k devido à conversão termoquímica das partículas de combustível sólido.

Um modelo de reator parcialmente agitado é utilizado para contabilizar a interação química da turbulência ao calcular os termos fonte devidos às reações químicas da fase gasosa ($\dot{w}_{g,k}, \dot{Q}_{com}$). Nesse modelo, as taxas médias de reação são modeladas de acordo com a Eq. 3.46.

$$\bar{\omega}_{g,k} = \kappa \dot{\omega}_{g,k}(\tilde{Y}, \tilde{T}, \bar{p}) \quad (3.46)$$

Onde κ é a fração de volume da mistura reativa, $\kappa = \frac{\tau_C}{\tau_c + \tau_m}$, τ_C e τ_m denotam o tempo de reação química local e o tempo de mistura local, respectivamente. O tempo de reação química, τ_C , é determinado a partir das taxas médias de reação do combustível $\bar{\omega}_f$ e do oxidante ou dos agentes de gaseificação $\bar{\omega}_o$, de acordo com a Eq. 3.47.

$$\frac{1}{\tau_c} = \max \left\{ \frac{-\bar{\omega}_f}{Y_f}, \frac{-\bar{\omega}_o}{Y_o} \right\} \quad (3.47)$$

Onde os subscritos f e o denotam o combustível e o oxidante ou os agentes de gaseificação, respectivamente. A Eq. 3.48 modela o tempo de mistura τ_m .

$$\tau_m = C_{mix} \sqrt{\frac{\nu}{\varepsilon}} \quad (3.48)$$

Onde C_{mix} é uma constante do modelo ($C_{mix}=1$ neste estudo). ν e ε denotam a viscosidade cinemática e a potência específica de transformação de energia cinética turbuente em energia térmica, respectivamente.

O tensor de tensão $\bar{\tau}_g$ na Eq. 3.43 é a soma das tensões viscosas e de REynolds, e pode ser escrito segundo a Eq. 3.49.

$$t \bar{\tau}_g = \bar{\tau}_l + \bar{\tau}_t \quad (3.49)$$

O tensor de tensão para um fluido newtoniano é expresso na Eq. 3.50.

$$\bar{\tau}_l = \mu_g ((\nabla \tilde{\mathbf{u}}_g) + (\nabla \tilde{\mathbf{u}}_g)^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}_g) \mathbf{I}) \quad (3.50)$$

E as tensões de Reynolds são modeladas de acordo com a equação 3.51.

$$\bar{\tau}_t = \mu_t \left((\nabla \tilde{\mathbf{u}}_g) + (\nabla \tilde{\mathbf{u}}_g)^T - \frac{2}{3}(\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}_g)\mathbf{I} \right) - \frac{2}{3}\bar{\rho}_g k \mathbf{I} \quad (3.51)$$

Onde μ_g é a viscosidade dinâmica, \mathbf{I} é o tensor unitário de segunda ordem. O modelo $k - \varepsilon$ padrão é usado para determinar a viscosidade turbulenta, $\mu_t = \rho_g C_\mu k^2 / \varepsilon$, onde k é a energia cinética turbulenta. k e ε são modelados usando as equações de balanço Eq. 3.52 e Eq. 3.53, respectivamente.

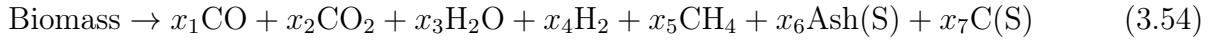
$$\frac{\partial(\alpha_g \bar{\rho}_g k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_g \bar{\rho}_g \tilde{\mathbf{u}}_g k) = \nabla \cdot \left(\alpha_g \left(\mu_g + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \nabla k \right) + \alpha_g P_k - \alpha_g \bar{\rho}_g \varepsilon + S_k \quad (3.52)$$

$$\frac{\partial(\alpha_g \bar{\rho}_g \varepsilon)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_g \bar{\rho}_g \tilde{\mathbf{u}}_g \varepsilon) = \nabla \cdot \left(\alpha_g \left(\mu_g + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right) + \alpha_g \frac{\varepsilon}{k} (C_{\varepsilon_1} P_k - C_{\varepsilon_2} \bar{\rho}_g \varepsilon) + S_\varepsilon, \quad (3.53)$$

Onde $P_k = \tau_t : \nabla \tilde{\mathbf{u}}_g$ é a **taxa de produção de energia cinética turbulenta**. S_k e S_ε são os termos de origem devido à iteração gás-sólido. Valores padrão das constantes do modelo são usados, $C_\mu = 0,09$, $C_{\varepsilon_1} = 1,44$, $C_{\varepsilon_2} = 1,92$, $C_{\sigma_k} = 1,0$ e C_{σ_ε} .

EQUAÇÕES QUE MODELAM A FASE SÓLIDA

O modelo de reação de pirólise de uma etapa é dada pela Eq. 3.54.



Onde x_j são as constantes estequiométricas. $\text{Ash}_{(s)}$ e $\text{C}_{(s)}$ denotam respectivamente a cinza e o carvão que estão em fase sólida.

A equação de balanço de massa para a partícula de biomassa i é dada pela Eq. 3.55.

$$\frac{dm_i}{dt} = \dot{m}_i = \dot{m}_{\text{vapor},i} + \dot{m}_{\text{devol},i} + \dot{m}_{\text{char},i} \quad (3.55)$$

Onde $\dot{m}_{\text{vapor},i}$, $\dot{m}_{\text{devol},i}$ e $\dot{m}_{\text{char},i}$ denotam a taxa de evaporação, a taxa de desvolatização e a taxa de conversão de carvão, respectivamente. A taxa de evaporação de umidade é modelada na Eq. 3.56.

$$\dot{m}_{\text{vapor},i} = \frac{\text{Sh} D_{\text{diff},va}}{d_i} \left(\frac{P_{\text{sat},T_i}}{\text{R}_u T_{i,s}} - X_\nu \frac{p_g}{\text{R}_u T_{i,s}} \right) A_{S_i} M_\nu \quad (3.56)$$

Onde Sh é o número de Sherwood, que é modelado usando a correlação de Ranz-Marshall, $Sh = (2 + 0,6Re_i^{1/2}Sc^{1/3})$. Re_i é o número de Reynolds com base no tamanho da partícula e na velocidade relativa entre a i -ésima partícula e o gás circundante. $D_{\text{diff},va}$, P_{sat,T_i} , A_{S_i} , $T_{i,s}$, X_ν , and M_ν representam respectivamente o coeficiente de difusão de vapor, a pressão de saturação, a área de superfície da partícula, a temperatura de superfície, a fração molar de vapor no gás

circundante e o peso molar do vapor. R_u é a constante universal dos gases. d_i é um diâmetro de partícula de esfera equivalente calculando com base na massa da partícula m_i e uma densidade de partícula constante ρ_i , ou seja, $d_i = (6m_i/\pi\rho_i)^{1/3}$.

A taxa de desvolatização é calculada com base no modelo de reação de pirólise (Eq. 3.54).

$$\dot{m}_{\text{devol},i} = -A_d \exp\left(-\frac{E_d}{R_u T_i}\right) m_{\text{volat},i} \quad (3.57)$$

Onde $A_d = 5,0 \times 10^6[\text{s}^{-1}]$ e $E_d = 1,2 \times 10^8[\text{J/Kmol}]$ são constantes de taxa, $m_{\text{volat},i}$ é a massa do volátil restante na partícula. A taxa de conversão é calculada com base nas reações heterogêneas (R7, R8 e R9) listadas na Tabela 3.6 ([18]).

$$\dot{m}_{\text{char},i} = \sum_{j=1}^3 \dot{m}_{\text{char},ij} \quad (3.58)$$

Tabela 3.6: Reações homogêneas e heterogêneas consideradas na combustão e gaseificação de biomassa. Nota: $C_{(s)}$ is solid phase char. C_k represents molar concentration of gas species k .

Reference	Homogeneous reactions	Kinetic rate [Kmol/m ³ /s]
R1 [31,36]	$\text{CH}_4 + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{CO} + 3\text{H}_2$	$R_1 = 0.312 \exp\left(-\frac{15,098}{T_g}\right) C_{\text{CH}_4} C_{\text{H}_2\text{O}}$
R2 [31,36]	$\text{CO} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{CO}_2 + \text{H}_2$	$R_2 = 2.5 \times 10^8 \exp\left(-\frac{16,597}{T_g}\right) C_{\text{CO}} C_{\text{H}_2\text{O}}$
R3 [31,36]	$\text{CO}_2 + \text{H}_2 \rightarrow \text{CO} + \text{H}_2\text{O}$	$R_3 = 9.43 \times 10^9 \exp\left(-\frac{20,563}{T_g}\right) C_{\text{CO}_2} C_{\text{H}_2}$
R4 [31,36]	$\text{CH}_4 + 2\text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2 + 2\text{H}_2\text{O}$	$R_4 = 2.119 \times 10^{11} \exp\left(-\frac{24,379}{T_g}\right) C_{\text{CH}_4} C_{\text{O}_2}$
R5 [31,36]	$\text{CO} + 0.5\text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2$	$R_5 = 1.0 \times 10^{10} \exp\left(-\frac{15,154}{T_g}\right) C_{\text{CO}} C_{\text{O}_2}$
R6 [31,36]	$\text{H}_2 + 0.5\text{O}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O}$	$R_6 = 2.2 \times 10^9 \exp\left(-\frac{13,109}{T_g}\right) C_{\text{H}_2} C_{\text{O}_2}$
Reference	Heterogeneous reactions	Kinetic rate [s/m]
R7 [40,43]	$C_{(s)} + 0.5\text{O}_2 \rightarrow \text{CO}$	$R_7 = 0.046 \times 10^7 \exp\left(-\frac{13,523}{R_u T_i}\right)$
R8 [40,43]	$C_{(s)} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{CO} + \text{H}_2$	$R_8 = 1.71 \times 10^7 \exp\left(-\frac{211,000}{R_u T_i}\right)$
R9 [40,43]	$C_{(s)} + \text{CO}_2 \rightarrow 2\text{CO}$	$R_9 = 9.1 \times 10^6 \exp\left(-\frac{166,000}{R_u T_i}\right)$

Onde $\dot{m}_{\text{char},ij}$ representam as taxas de consumo de carvão por reações com O_2 ($j = 1$, reação R7), H_2O ($j = 2$, reação R8), e CO_2 ($j = 3$, reação R9).

$$\dot{m}_{\text{char},ij} = -A_s i p_j \frac{R_{\text{diff},j} R_{\text{kin},j}}{R_{\text{diff},j} + R_{\text{kin},j}} \quad (3.59)$$

$$R_{\text{diff},j} = C_j \frac{[0.5(T_g + T_i)]^{0.75}}{d_i} \quad (3.60)$$

$$R_{\text{kin},j} = A_j \exp\left(-\frac{E_j}{R_u T_i}\right) \quad (3.61)$$

Onde $R_{\text{dif},j}$, $R_{\text{kin},j}$, C_j , T_g , p_g , A_j e E_j representam respectivamente o coeficiente da taxa de difusão, o coeficiente da taxa cinética, a constante da taxa de difusão de massa, a temperatura

do gás, a pressão parcial das espécies gaseificantes no gás que circunda a partícula e as constantes da taxa de Arrhenius para reações de carvão com as espécies O₂, H₂O e CO₂ (R7, R8 e R9 na Tabela 3.6). $C_j = 5 \times 10^{-12}(\text{s}/\text{K}^{0,75})$.

EQUAÇÕES DE QUANTIDADE DE MOVIMENTO LINEAR

A cinemática da i-ésima partícula simulada é modelada pela segunda lei de Newton, Eq. 3.62.

$$\frac{d\mathbf{u}_i}{dt} = \frac{\beta}{\rho_i \theta} (\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_i) + \mathbf{g} \left(1 - \frac{\rho_g}{\rho_i} \right) - \frac{1}{\rho_i} \nabla p_g - \frac{1}{\rho_i \theta} \nabla \tau \quad (3.62)$$

Onde \mathbf{u}_i , ρ_i e θ denotam respectivamente a velocidade e a densidade da i-ésima partícula e a fração de volume sólido na posição espacial \mathbf{x}_i no tempo t . Os termos do lado direito representam a soma de todas as forças que atuam na i-ésima partícula pelo gás e partículas circundantes. As forças consideradas incluem, da esquerda para a direita, o arrasto, gravidade, gradiente de pressão e a tensão interpartícula. A força de massa virtual, força de Basset e força de sustentação, como a força de Saffman e a força de Magnus, que desempenham um papel no movimento das partículas, são negligenciadas. Com um dado \mathbf{u}_i , a posição da partícula é computada pela integração da Eq. 3.63.

$$d\mathbf{x}_i/dt = \mathbf{u}_i \quad (3.63)$$

Na Eq. 3.62, a fração de volume sólido é modelada pela Eq. 3.64.

$$\theta(\mathbf{x}_i, t) = \iint f(m_i, \mathbf{u}_i, \mathbf{x}_i, t) \left(\frac{m_i}{\rho_i} \right) dm_i d\mathbf{u}_i \quad (3.64)$$

Onde $f(m_i, \mathbf{u}_i, \mathbf{x}_i, t)$ é uma função de distribuição de partículas, que descreve a distribuição estatística de massa e velocidade de partículas na posição espacial \mathbf{x}_i no tempo t . Ou seja, $f(m_i, \mathbf{u}_i, \mathbf{x}_i, t) dm_i d\mathbf{u}_i$ é o número médio de partículas por unidade de volume com velocidades nos intervalos $(\mathbf{u}_i, \mathbf{u}_i + d\mathbf{u}_i)$ e massa no intervalo $(m_i, m_i + dm_i)$. Neste modelo, assume-se que a função de distribuição de partículas é independente da temperatura e composição das partículas.

No modelo MP-PIC f é obtido a partir da equação de Liouville, que é a expressão matemática do balanço do número de partículas por volume movendo-se ao longo de trajetórias dinâmicas no espaço de fase das partículas, Eq. 3.65.

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla \cdot (f \mathbf{u}_i) + \nabla_u \cdot (f \mathbf{A}_i) = \frac{f_G - f}{\tau_G} + \frac{f_D - f}{\tau_D} \quad (3.65)$$

Onde $\mathbf{A}_i = d\mathbf{u}_i/dt$ é a aceleração da partícula, f_G é a função de distribuição de partículas isotrópicas de equilíbrio, f_D é a função de distribuição de partículas de amortecimento de colisão, τ_G e τ_D são tempos de relaxamento. ∇ e ∇_u são operadores de divergência com relação ao espaço físico \mathbf{x} e à velocidade \mathbf{u}_i .

O modelo de força de arrasto utilizado para a partícula individual i é dado pela Eq. 3.66.

$$\mathbf{f}_i = \frac{V_i \beta}{\theta} (\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_i) \quad (3.66)$$

Onde V_i é o volume da i-ésima partícula. Nas Eqs. 3.62 e 3.66, o parâmetro de arrasto β é modelado pela Eq. 3.67.

$$\beta = \begin{cases} 150 \frac{(1-\alpha_g)^2 \mu_g}{\alpha_g^2 d_i^2} + 1,75 \frac{(1-\alpha_g) \rho_g}{\alpha_g d_i} |\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_i| & \alpha_g < 0,8 \\ \frac{3}{4} C_d \frac{(1-\alpha_g) \rho_g}{d_i} |\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_i| \alpha_g^{-2,65} & \alpha \geq 0,8 \end{cases} \quad (3.67)$$

Onde C_d é o coeficiente de arrasto, Eq. 3.68.

$$C_d = \begin{cases} \frac{24}{Re_i} (1 + 0,15 Re_i^{0,687}) & Re_i < 1000 \\ 0,44 & Re_i \geq 1000 \end{cases} \quad (3.68)$$

E o número de Reynolds da partícula é definido pela Eq. 3.69

$$Re_i = \alpha_g \rho_g d_i |\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_i| / \mu_g \quad (3.69)$$

EQUAÇÃO DA ENERGIA

A temperatura da partícula é obtida a partir da equação de balanço da energia para a i-ésima partícula, dada pela Eq. 3.70.

$$m_i C_{p,i} \frac{dT_i}{dt} = h_i A s_i (T_g - T_i) + \frac{\varepsilon_i A s_i}{4} (G - 4\sigma T_i^4) - h_{vapor,i} \dot{m}_{vapor,i} - h_{devol,i} \dot{m}_{devol,i} - \sum_{j=1}^3 h_{i,j} \dot{m}_{char,ij} \quad (3.70)$$

Onde $C_{p,i}$, ε_i , σ , $h_i = (Nu \lambda_{g,s} / d_i)$, e G representam a capacidade térmica da partícula, emissividade, constante de Stefan-Boltzmann, coeficiente de transferência térmica interfásica e radiação incidente, respectivamente. $h_{vapor,i}$, $h_{devol,i}$, e $h_{i,j}$ representam o calor latente, o calor da pirólise e os calores das reações de carvão com O_2 , H_2O e CO_2 , respectivamente. Nu é o número de Nusselt, que é modelado usando a correlação de Ranz-Marshall, $Nu = 2 + 3/5 Re_i^{1/2} Pr^{1/3}$. Pr é o número de Prandtl do gás circundante, e $\lambda_{g,s}$ representa a condutividade térmica do gás circundante. A radiação incidente G é obtida do modelo de radiação P-1.

3.4.2 TERMOS FONTES PARA INTERAÇÃO PARTÍCULA/GÁS

Na abordagem CGM, um número finito de partículas virtuais (doravante denominados parcelas) é simulado. Suponha que o número de parcelas seja N_p . A i-ésima parcela contém múltiplas partículas reais; no entanto, todas as partículas têm as mesmas propriedades, ou seja, cada partícula real na i-ésima parcela tem a mesma massa m_i , velocidade \mathbf{u}_i , temperatura T_i e diâmetro d_i . As equações que modelam a partícula real individual na i-ésima parcela foram apresentadas na seção 3.4.1.

No espaço físico \mathbf{x} no tempo t , o número de partículas reais por unidade de volume que pertencem à parcela i é n_i . Os termos fonte devido à interação gás/sólido para a equação de continuidade, equação de quantidade de movimento linear, equação de entalpia, e as equações de transporte de espécies são dadas pela Eq. 3.71.

$$\begin{aligned}\bar{S}_m &= - \sum_{i=1}^{N_p} n_i \dot{m}_i \\ \bar{S}_q &= - \sum_{i=1}^{N_p} n_i q_i \\ \bar{S}_u &= - \sum_{i=1}^{N_p} n_i \mathbf{f}_i \\ \bar{S}_{Y_k} &= - \sum_{i=1}^{N_p} n_i \dot{m}_{k,i}\end{aligned}\tag{3.71}$$

Onde $\dot{m}_i = \sum_{k=1}^N \dot{m}_{k,i}$ é dado na Eq. 3.55, $q_i = m_i C_{p,i} \frac{dT_i}{dt}$ é dado na Eq. 3.70, e $\dot{m}_{k,i}$ é devido à reação de pirólise (Eq. 3.54) e reações de carbonização (R7, R8 e R9, Tabela 3.6).

3.4.3 REDISTRIBUIÇÃO ESPACIAL DE PARCELAS E TERMOS FONTE

Na abordagem CGM-PCM, a fração de volume sólido em uma dada posição e tempo é calculada usando a Eq. 3.64 com todas as partículas nas parcelas levadas em consideração, e a fração de gás é então dada pela Eq. 3.72.

$$\alpha_g(\mathbf{x}, t) = 1 - \theta(\mathbf{x}, t)\tag{3.72}$$

Fisicamente, $\theta(\mathbf{x}, t) < 1$. No entanto, como um grande número de partículas são agrupadas em uma única parcela, cujo volume pode exceder o volume da célula local, isso pode levar a $\theta(\mathbf{x}, t) > 1$ ou $\alpha_g < 0$, que não é físico e numericamente pode dar origem à instabilidades. Esse problema é particularmente verdadeiro no PCM de baixo custo mais amplamente usado. Neste trabalho, foi proposto um método do kernel de distribuição (DKM), que tem similaridade com o método DBM, ao mesmo tempo em que oferece a vantagem da fácil implementação e baixo custo computacional. Conforme mostrado na Fig. 3.3, as parcelas em uma célula computacional PCM (marcada como cell-o) são aglomerados de areia e partículas de biomassa do domínio circundante (marcado como uma região circular). Para evitar instabilidade numérica causada por localmente muitas partículas na cell-o, no DKM as partículas e os termos de fonte associados nas parcelas na cell-o são redistribuídos para o domínio circundante do qual as partículas são agrupadas. O algoritmo de redistribuição é construído de tal forma que o volume da fase sólida e os termos de fonte no domínio de redistribuição são conservados antes e depois da distribuição.

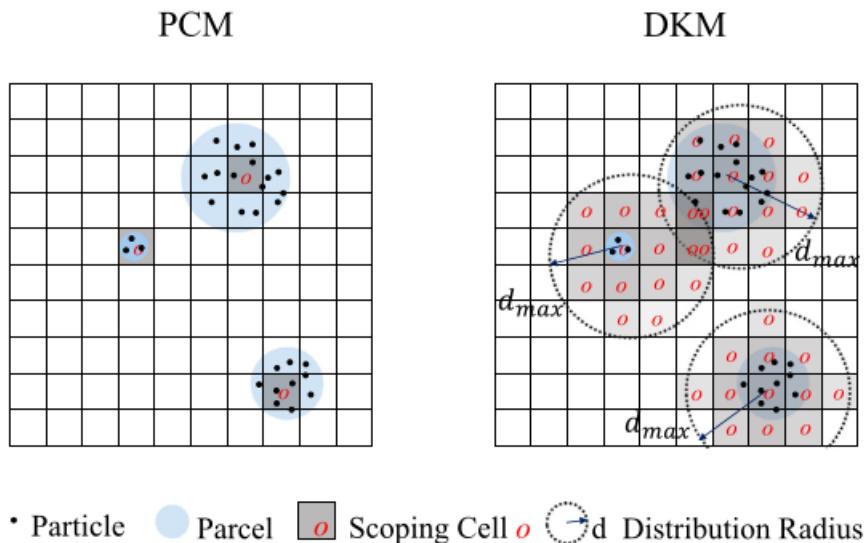


Fig. 1. Schematic illustration of PCM and DKM.

Figura 3.3: Retirado de [18].

Uma função núcleo de filtragem $g(\mathbf{x}, t)$, que é definida com base na distância das células circundantes à cell-o. A integração da função núcleo sobre todo o espaço físico é igual a um. As células circundantes de uma célula local podem ser localizadas por um novo algoritmo de busca de células com base em uma distância dada.

O volume toral da fase sólida em um determinado domínio Ω é dado pela Eq. 3.73.

$$V_s = \int_{\Omega} \theta_o(\mathbf{x}, t) dV \quad (3.73)$$

Onde o subscrito " o " indica que a quantidade é antes da redistribuição. A seguir, o subscrito " r " será usado para denotar que a quantidade é depois da redistribuição. V_s deve permanecer o mesmo antes e depois da redistribuição.

$$V_s = \int_{\Omega} \theta_o(\mathbf{x}, t) dV \equiv \int_{\Omega} \theta_r(\mathbf{x}, t) dV = \int_{\Omega} g(\mathbf{x}, t) V_s dV \quad (3.74)$$

O que indica que a fração de volume sólido após a redistribuição é dada pela Eq. 3.75.

$$\theta_r(\mathbf{x}, t) = g(\mathbf{x}, t)V_s = g(\mathbf{x}, t) \int_{\Omega} \theta_o(\mathbf{x}, t)dV \quad (3.75)$$

Uma função de redistribuição simples $q'(\mathbf{x}, t)$ é empregada na Eq. 3.76.

$$g'(\mathbf{x}, t) = \left(1 - \frac{|\mathbf{x} - \mathbf{x}_o|}{d_{max}}\right)^2 \quad (3.76)$$

Onde \mathbf{x}_o é a posição do centroide da cell-o. d_{mas} é uma distância prescrita dentro da qual o volume da fase sólida e os termos fonte serão redistribuídos. A função $g'(\mathbf{x}, t)$ pode não satisfazer a Eq. 3.74. Pela normalização de $g'(\mathbf{x}, t)$, a função de filtragem do núcleo $g(\mathbf{x}, t)$ pode ser obtida de $g'(\mathbf{x}, t)$, Eq. 3.77.

$$g(\mathbf{x}, t) = g'(\mathbf{x}, t) / \int_{\Omega} g'(\mathbf{x}, t) dV \quad (3.77)$$

ou seja,

$$\int_{\Omega} g(\mathbf{x}, t) dV = 1 \quad (3.78)$$

$g(\mathbf{x}, t)$ pode ser usado para redistribuir o termo fonte para a equação do balanço de massa, Eq. 3.79.

$$S_{m,r}(\mathbf{x}, t) = g(\mathbf{x}, t) S_M = g(\mathbf{x}, t) \int_{\Omega} S_{m,o}(\mathbf{x}, t) dV \quad (3.79)$$

que é demonstrado satisfazer a conservação de massa, Eq. 3.80.

$$S_M = \int_{\Omega} S_{m,o}(\mathbf{x}, t) dV \equiv \int_{\Omega} S_{m,r}(\mathbf{x}, t) dV = \int_{\Omega} S_M g(\mathbf{x}, t) dV \quad (3.80)$$

Da mesma forma, os termos fonte para as equações de quantidade de movimento linear e a equação de energia e as equações de transporte de espécies podem ser redistribuídos usando $g(\mathbf{x}, t)$:

$$\mathbf{S}_{u,r}(\mathbf{x}, t) = g(\mathbf{x}, t) \int_{\Omega} \mathbf{S}_{u,o}(\mathbf{x}, t) dV \quad (3.81)$$

$$S_{q,r}(\mathbf{x}, t) = g(\mathbf{x}, t) \int_{\Omega} S_{q,o}(\mathbf{x}, t) dV \quad (3.82)$$

$$S_{Y_k,r}(\mathbf{x}, t) = g(\mathbf{x}, t) \int_{\Omega} S_{Y_k,o}(\mathbf{x}, t) dV \quad (3.83)$$

3.5 ARTIGO KUROSE ET AL. 2022 [17]

O objetivo deste artigo foi propor uma estrutura numérica para modelar o acoplamento de atomização e combustão de chamas densas de spray, mantendo um custo computacional razoável. Os resultados são comparados com dados experimentais obtidos do queimador de agulhas de Sydney ([15],[11]). O conceito é o seguinte. A atomização do combustível líquido é resolvida por uma simulação numérica detalhada, na qual as fases contínuas gasosa e líquida são estritamente resolvidas em uma estrutura euleriana, e os componentes euleriana das gotículas de líquido são transformados em gotículas lagrangianas em uma determinada seção transversal a jusante, ou seja, seção transversal de amostragem, cujas informações são armazenadas em um banco de dados. Em seguida, o processo de combustão é resolvido por uma simulação de grande turbilhão (LES) com um modelo de chama que adota o banco de dados pré-armazenado de gotículas lagrangianas, ou seja, por um acoplamento unidirecional entre uma simulação VOF e uma simulação de combustão.

Neste trabalho, todos os cálculos foram realizados usando um solucionador LES não estruturado, ou seja, o FrontFlow/Red estendido pela Universidade de Kyoto ([14], [12], [7]).

3.5.1 MODELO FÍSICO

3.5.2 MODELO MATEMÁTICO

Equações para a modelagem da região de pulverização densa.

Na região de pulverização densa, onde ocorre o processo de atomização, as fases contínuas líquida e gasosa são tratadas como fluidos incompressíveis e ambas são resolvidas em uma estrutura Euleriana.

Equação da continuidade:

$$\rho \nabla \cdot \nabla = 0. \quad (3.84)$$

4. METODOLOGIA

4.1 COLUNA DE BOLHAS

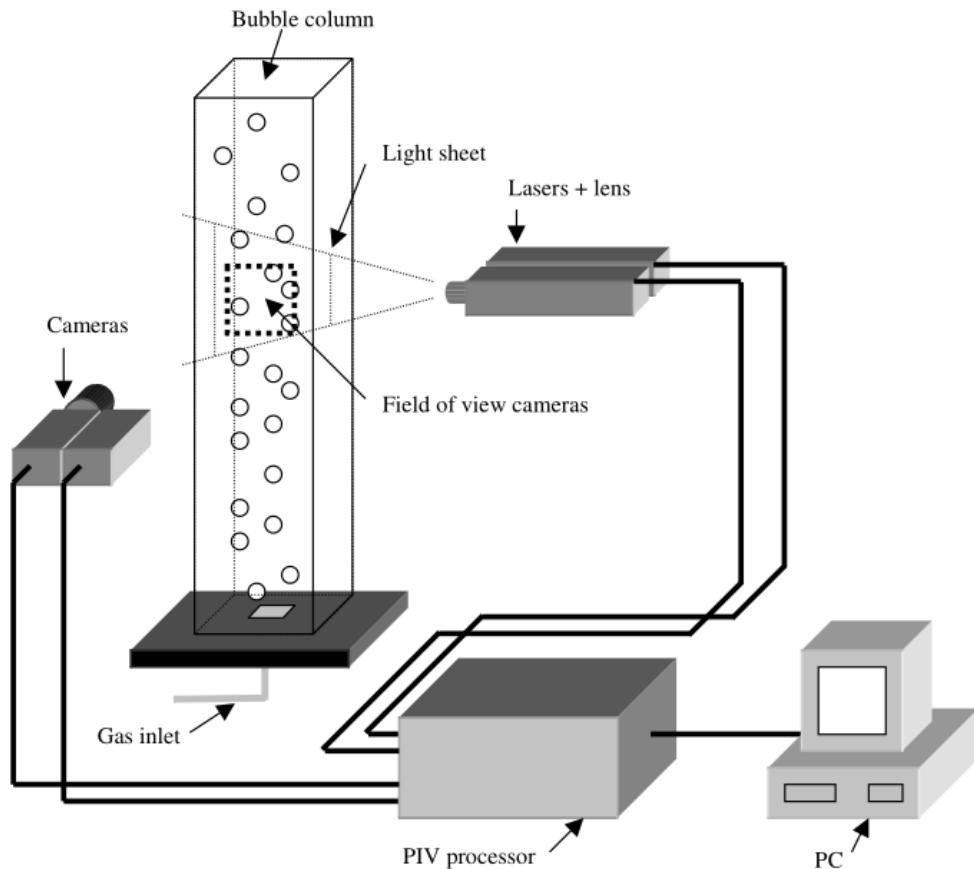
[3] analisam o problema de um reservatório vertical preenchido com água. Nesse reservatório são injetadas no seu interior bolhas com diâmetros e velocidades constantes. O fenômeno de coalescência não é considerado, devido a mistura de sal de cozinha na água destilada. Na Figura 4.1 tem-se a representação esquemática da configuração experimental do PIV. A coluna tem uma seção de ($W \times D$) de $0,15 \times 0,15 \text{ m}^2$ e uma altura (L) de 1 m. O ar é introduzido no sistema através de uma placa perfurada. A placa contém 49 furos, com diâmetro de 1 mm, posicionados no meio da coluna a um passo quadrado de 6,25 mm. A coluna de bolhas foi operada com um nível inicial de líquido de 0,45 m ($L/D = 3$) e uma velocidade superficial do gás de 5,0 mm/s.

O escoamento de água foi semeado com partículas rhodamin-B com diâmetro de $50 \mu\text{m}$ e densidade de $1,5 \cdot 10^3 \text{ kg/m}^3$. A fração volumétrica das partículas foi de 10^{-4} . Um par de lasers Nd:YAG pulsados New Wave MiniLase de 15 Hz, com lente de expansão de feixe, foi utilizado para criar uma lámina de luz com profundidade de 3 mm. Duas câmeras Kodak Megaplus ES 1.0 de 30 Hz foram utilizadas para registrar imagens de $1008 \times 1018 \text{ px}^2$ do escoamento. A primeira câmera foi equipada com um filtro passa-banda laranja (comprimento de onda do filtro) para detectar a semeadura fluorescente. A segunda câmera, com um filtro passa-banda correspondente ao comprimento de onda da luz laser, detectou apenas a fase gasosa. Um processador Dantec PIV 2100 sincronizou o laser e as câmeras. No sistema PIV/LIF, 300 pares de imagens foram registrados durante um período de 900 s, para garantia de uma média de tempo estável. As medições foram realizadas em vários planos na coluna. No experimento PIV com uma única câmera, apenas 50 imagens foram registradas. Na Tabela 4.1 tem-se uma visão geral das configurações experimentais.

No trabalho de [4] estuda-se o uso de simulações LES, comparando com simulações que utilizam o Modelo de fechamento de turbulência $k-\varepsilon$. Os resultados são comparados com os experimentos de [3]. No caso de malha grossa, a área de entrada de gás foi implementada em uma área central de 3×3 células de malha. Uma velocidade superficial do gás de $4,9 \cdot 10^{-3} \text{ m/s}$ leva a uma velocidade do gás de entrada de 0,12 m/s. No caso de uma malha de 8×8 células, resulta em uma velocidade do gás de entrada de 0,078 m/s.

[2] realiza o estudo do problema de injeção de bolhas na parte inferior de uma coluna vertical preenchida com água. Nesse estudo foi proposto uma viscosidade modificada e uma força de arrasto em função da fração volumétrica da fase contínua. Também, avalia-se diferentes modelos

Figura 4.1: Representação esquemática da configuração experimental do PIV.



Fonte: [3].

Tabela 4.1: Visão geral das configurações experimentais.

Configuração de medição	PIV/LIF	PIV de câmera única
Campo de visão	$0,159 \times 0,161 \text{ m}^2$	$0,079 \times 0,080 \text{ m}^2$
Áreas de interrogação	$64 \times 64 \text{ px}^2 = 0,01 \times 0,01 \text{ m}^2$	$64 \times 64 \text{ px}^2 = 0,01 \times 0,01 \text{ m}^2$
Atraso de tempo de exposição	1,0 ms	2,5 ms
Tempo médio	900 s	150 s

Fonte: ([3]).

de fechamento para a turbulência e compara-se os resultados da formulação de três vias com a de duas vias.

4.1.1 MODELAGEM [2]

MODELO FÍSICO

A coluna de bolhas possui 0,6 m de altura e seção quadrada de lado 0,15 m. A coluna está preenchida com água até 0,45 m, sendo o restante preenchido com ar. O escoamento é considerado incompressível e isotérmico. A placa localizada na parte inferior da coluna contém 49 orifícios, com diâmetros de 1 mm, posicionados na parte central da coluna com um

espaçamento quadrado de 6,25 mm. A velocidade de injeção das bolhas foi de 0,078 m/s.

MODELO MATEMÁTICO

Nesta subseção tem-se o sistema completo de equações matemáticas para escoamentos bifásicos densos incompressíveis e turbulentos.

Na Equação (4.1) tem-se o balanço de massa,

$$\frac{\partial \varepsilon^k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\varepsilon^k \bar{u}_i) = -\frac{\Gamma}{\rho^k}. \quad (4.1)$$

Onde $(\tilde{\cdot})$ e $(\bar{\cdot})$ são operadores de filtragem definidas em [2] e o sobrescrito k refere-se a fase k . ε é a fração de volume, u_i é a componente da velocidade, ρ é a massa específica. Γ é dado pela Eq. (4.2)

$$\Gamma = \int_{\partial\Omega^k} g(\S - \dagger) \rho^k (u_i - v_i)^k n_i d^2 \dagger, \quad (4.2)$$

onde, Γ e n_i são os componentes do vetor normal à interface. Esta integral de superfície é realizada sobre um contorno fechado ($\partial\Omega^k$) em todas as partículas no domínio. g é uma função filtro.

Na Equação (4.3) tem-se o balanço de quantidade de movimento linear,

$$\frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon^k \tilde{\rho}^k \bar{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\varepsilon^k \tilde{\rho}^k \bar{u}_i \bar{u}_j) = -\varepsilon^k \frac{\partial p^*}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} (2\varepsilon^k \mu_{ef} \bar{S}_{ij}^d) + M_i^d - u_{s,i} \Gamma + \varepsilon^k \rho g_i + \varepsilon^k f_{\sigma_i}. \quad (4.3)$$

Onde $u_{s,i}$ são os componentes da média da velocidade interfacial da fase k , μ_{ef} é a viscosidade efetiva, p^* é a pressão modificada, e \bar{S}_{ij}^d é o tensor taxa de deformação. O termo g_i representa o campo gravitacional e f_{σ_i} refere-se a modelagem das forças interfaciais.

Na Equação (4.4) tem-se o transporte da interface ([5]),

$$\frac{\partial \gamma}{\partial t} + u_i \frac{\partial \gamma}{\partial x_i} = 0, \quad (4.4)$$

sendo γ uma função coloração, dada por $\gamma = (1/V_K) \int \int \int_K \chi(x_i, t) dx_i$, onde V_K é o volume da célula K .

Para a força de tensão interfacial, tem-se a Eq. (4.5),

$$f_{\sigma_i} = \sigma \kappa \frac{\partial \gamma}{\partial x_i}. \quad (4.5)$$

Para o termo de arrasto generalizado a Eq. (4.6), e para a fração de volume da partícula a Eq. (4.7),

$$M_i^d = - \sum_d g(x_i - x_i^d) f_{di}, \quad (4.6)$$

$$\varepsilon^k = 1 - \sum_d g(x_i - x_i^d) V_d, \quad (4.7)$$

onde \sum_d representa a soma sobre todas as partículas do domínio, f_{di} é a força de arrasto, x_i^d é a posição da partícula e V_d é o volume da partícula.

Na Equação (4.8) tem-se o balanço de energia térmica,

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon^k \tilde{\rho}^k \bar{T}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\varepsilon^k \tilde{\rho}^k \tilde{c}_p \bar{u}_i \bar{T}) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(K_{ef} \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_i} \right) + A. \quad (4.8)$$

K_{ef} é o coeficiente de condução térmica efetivo, c_p é o coeficiente de capacidade térmica pressão constante e T é o campo de temperatura. A é dado pela Eq. (4.9).

$$A = \varepsilon^k \tilde{\Phi} + \frac{D}{Dt}(\varepsilon^k P) + J - (c_p T)_s \Gamma. \quad (4.9)$$

Onde Φ é a função potência específica de transformação viscosa em energia cinética em energia térmica e J é a soma do fluxo de densidade e energia térmica sobre a partícula.

As equações lagrangianas são dadas pelas Eq. (4.10) e Eq. (4.11),

$$\frac{dv_i}{dt} = \frac{(u_i - v_i)}{\tau_p} \frac{R_{ep} C_D}{24} + \frac{(\rho_p - \rho^k)}{\rho_p} g_i, \quad (4.10)$$

Onde C_D é o coeficiente de arrasto, R_{ep} é o número de Reynolds da partícula, ρ^k é a massa específica da fase k , ρ_p é a massa específica da partícula, u_i é a velocidade do campo euleriano, v_i é a velocidade da partícula, e τ_p é o tempo característico da partícula.

$$\frac{dT}{dt} = \frac{(T^k - T_d)}{\tau_c} \frac{Nu_c}{2}. \quad (4.11)$$

Onde T^k é a temperatura da fase contínua, T_d é a temperatura da partícula, Nu_c é o número de Nusselt que varia dependendo do número de Reynolds da partícula.

MODELO COMPUTACIONAL

Na Tabela 4.2 tem-se os modelos de fechamento para a turbulência utilizados. Para os casos 1,2,3 e 4 utilizou-se a malha de 32x32x128. A modificação da viscosidade molecular devida a presença da fase discreta foi implementada como $\mu' = \mu^k [(\varepsilon^k)^{-n-1} - 1]$, tendo em vista que quando $n = 1$, é o valor adotado quando a fase dispersa é gasosa.

4.1.2 RESULTADOS ([2])

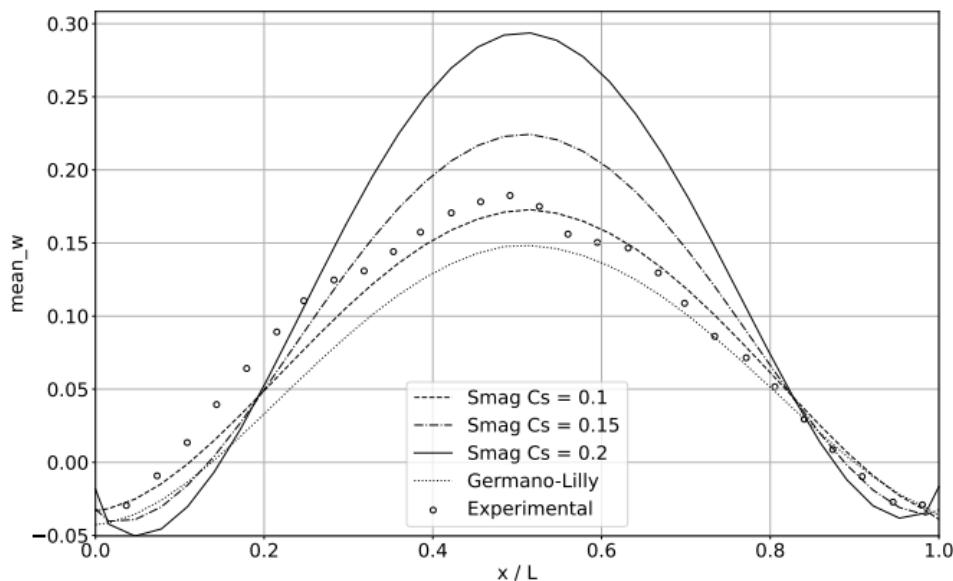
Na Figura 4.2 tem-se os resultados para os casos 1,2,3 e 4 da velocidade média do campo euleriano comparado com o resultado experimental de [4]. Esses casos se diferenciam na constante de Smagorinsky adotada (casos 1,2 e 4), e no modelo de fechamento da turbulência para o caso 4. O caso 2 (constante de Smagorinsky igual a 0,1) apresentou melhor resultado para a variável de analisada em questão, comparado com os resultados experimentais.

Tabela 4.2: Modelos de fechamento da turbulência que foram simulados.

Modelo	C_s	Caso
Smagorinsky	0,15	1
Smagorinsky	0,1	2
Smagorinsky	0,2	3
Germano-Lilly	-	4
Smagorinsky + Van Driest	0,2	5

Fonte: [2].

Figura 4.2: Velocidade média do campo euleriano comparado com o resultado do experimento material de [4].



Fonte: [2].

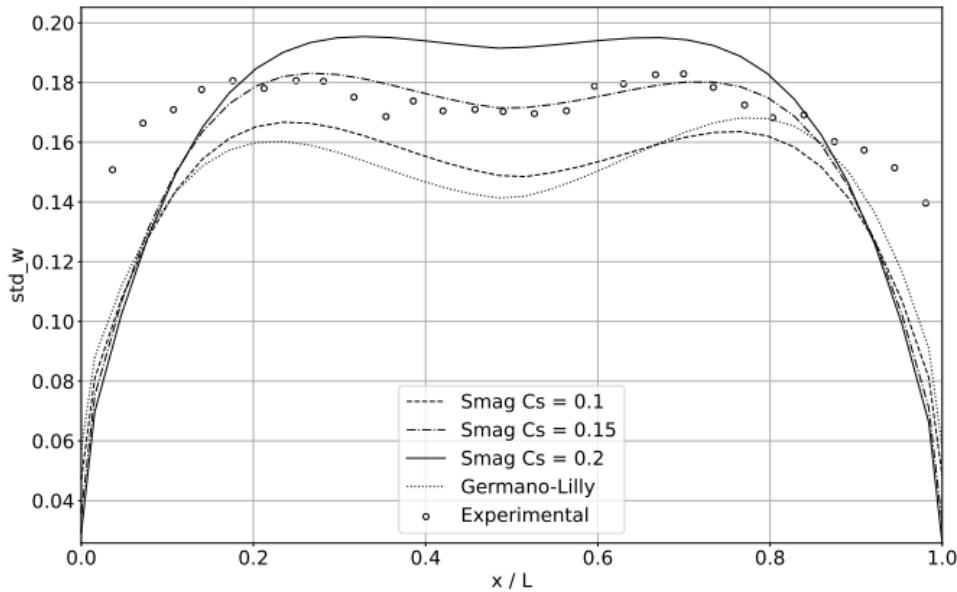
Na Figura 4.3 tem-se os resultados para os casos 1 a 4 do desvio padrão do campo da flutuação da velocidade euleriana na direção z, comparado com o resultado do experimento material de [4]. O caso 1 (constante de Smagorinsky igual a 0,15) apresentou melhor resultado para a variável analisada, comparada aos resultados experimentais.

Na Figura 4.4 tem-se os resultados para os casos 1 a 4 do desvio padrão do campo da flutuação da velocidade euleriana na direção x, comparado com o resultado do experimento material de [4]. Todos os casos apresentaram resultados bem próximos comparado aos resultados experimentais.

Na Figura 4.5 tem-se os resultados para os casos 1 a 4 da energia cinética turbulenta do campo de flutuação de velocidade euleriana, comparado com o resultado do experimento material de [4]. O caso 1 (constante de Smagorinsky igual a 0,15) apresentou o melhor resultado dentre os demais.

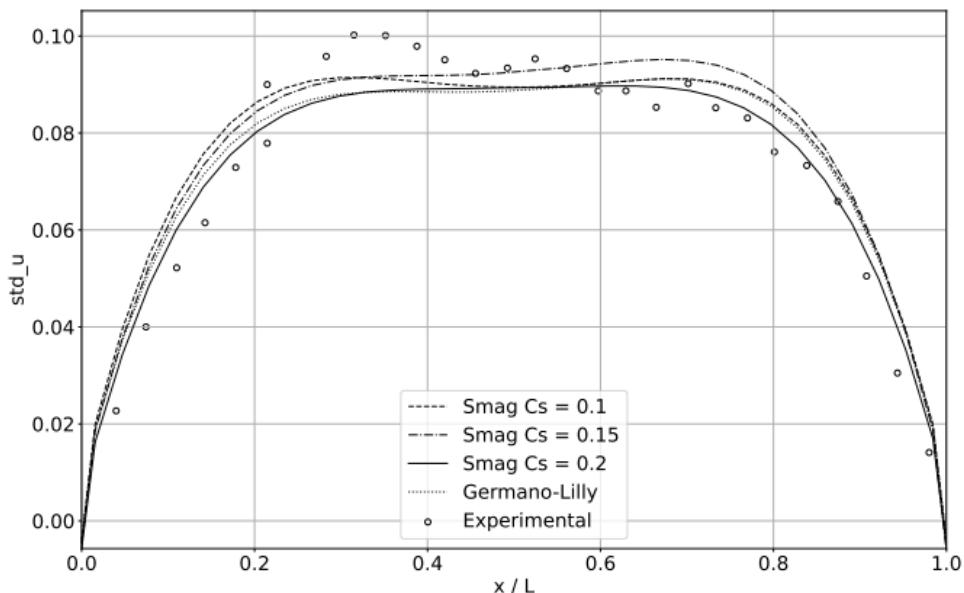
Na Figura 4.6 tem-se os resultados utilizando o modelo de fechamento de Smarorinsky ($C_s = 0,2$) mais o modelo de função de parede de Van Driest, comparado com o resultado do experimento material de [4]. Na Fig. 4.6a tem-se a comparação da velocidade média do campo

Figura 4.3: Desvio padrão do campo da flutuação da velocidade euleriana na direção z, comparado com o resultado do experimento material de [4].



Fonte: [2].

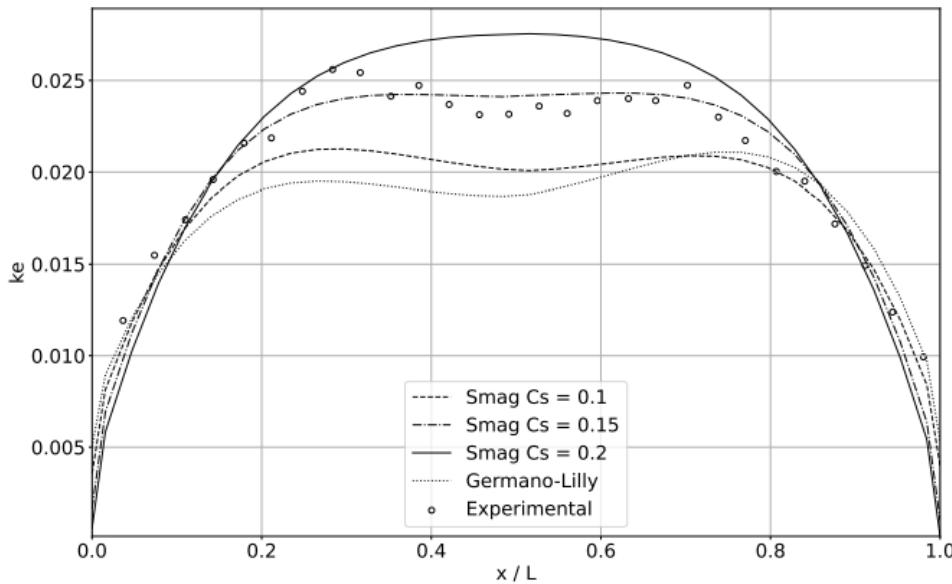
Figura 4.4: Desvio padrão do campo da flutuação da velocidade euleriana na direção x, comparado com o resultado do experimento material de [4].



Fonte: [2].

euleriano, na Fig. 4.6b compara-se com o desvio padrão do campo da flutuação da velocidade euleriana na direção z e na Fig. 4.6c na direção x. Na Fig. 4.6d tem-se a comparação da energia cinética turbulenta do campo de flutuação de velocidade euleriana. Segundo [2], o modelo de Van Driest comparado com o Caso 3 ($C_s = 0,2$), apresenta uma atenuação dos campos calculados. E a inclusão de um termo de amortecimento para o campo de velocidade próximo à parede, impacta diretamente nessa atenuação.

Figura 4.5: Energia cinética turbulenta do campo de flutuação de velocidade euleriana, comparado com o resultado do experimento material de [4].



Fonte: [2].

4.1.3 MODELAGEM

Nesta seção tem-se a modelagem do problema discutido nas seções anteriores. Para a simulação numérico-computacional foi utilizado o software MFSim, desenvolvido pelo Laboratório de Mecânica dos Fluidos da Universidade Federal de Uberlândia (UFU). O modelo físico adotado foi o mesmo descrito em [2].

MODELO COMPUTACIONAL

O domínio computacional utilizado para as simulações foi o mesmo adotado por [2]. Foi utilizado o *branch dev/BIT2*, com algumas alterações no código comparando com o *branch master*, para melhor modelagem do problema proposto.

Na Tabela 4.3 tem-se os métodos de discretização utilizados para o acoplamento pressão-velocidade.

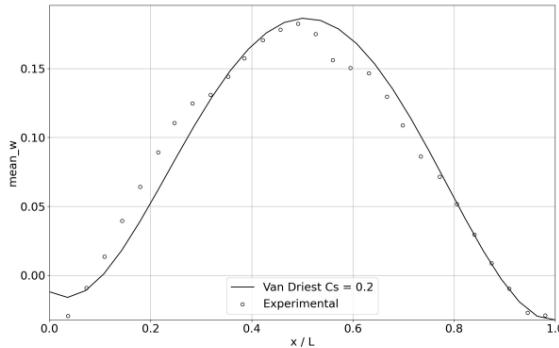
Tabela 4.3: Acoplamento pressão-velocidade e modelos de discretização.

Discretização	Método
Acoplamento pressão-velocidade	Passos fracionados
Temporal	Semi-implícito - sbdf
Formulação	Divergente ("Conservativa")
Advecção	Barton
Momentum	Malalasekera
CFL global	0,1

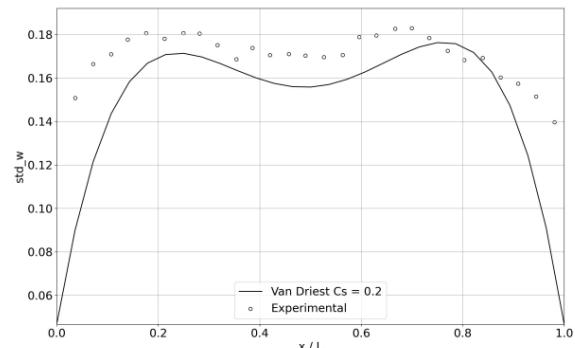
Fonte: Próprio autor.

Figura 4.6: Comparado com o resultado do experimento material de [4].

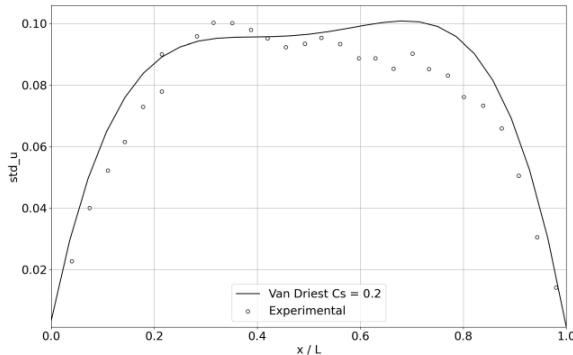
(a) Velocidade média do campo euleriano.



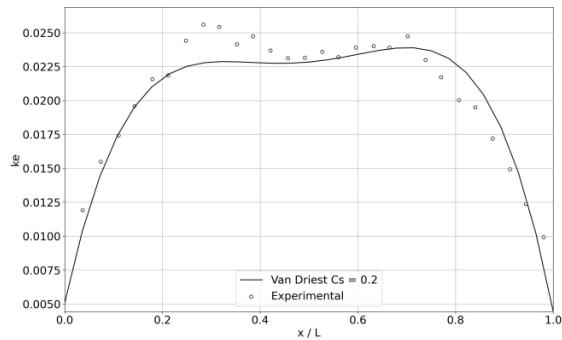
(b) Desvio padrão do campo da flutuação da velocidade euleriana na direção z.



(c) Desvio padrão do campo da flutuação da velocidade euleriana na direção x.



(d) Energia cinética turbulenta do campo de flutuação de velocidade euleriana.



Fonte: [2].

Na Tabela 4.4 tem-se os dados referentes aos parâmetros de controle das fases contínua e dispersa.

Tabela 4.4: Parâmetros de controle das fases.

Parâmetro	Valor
Massa específica da fase contínua, kg/m ³	1,2
Massa específica da fase dispersa, kg/m ³	1000
Viscosidade dinâmica da fase contínua, Pacots	1,72E-05
Viscosidade dinâmica da fase dispersa, Pacots	1,002E-03
Coeficiente de tensão interfacial, N/m	0,072
Campo gravitacional, m/s ² (X, Y, Z)	0; 0; -9,81

Fonte: Prprio autor.

O tempo físico final de simulação é 200 s, e é utilizado a metodologia de passo de tempo dinâmico. É utilizado o método *Volume of Fluid*(VoF) para a fase líquida e o método *Discrete Phase Model* (DPM) para a fase gasosa.

Na Tabela 4.5 tem-se os modelos de fechamento de turbulência utilizados para cada caso.

Tabela 4.5: Modelos de fechamento da turbulência que foram simulados.

Modelo	C_s	Caso	Células no lbot
Smagorinsky Dinâmico + Filtro Explícito	-	1	32x32x128

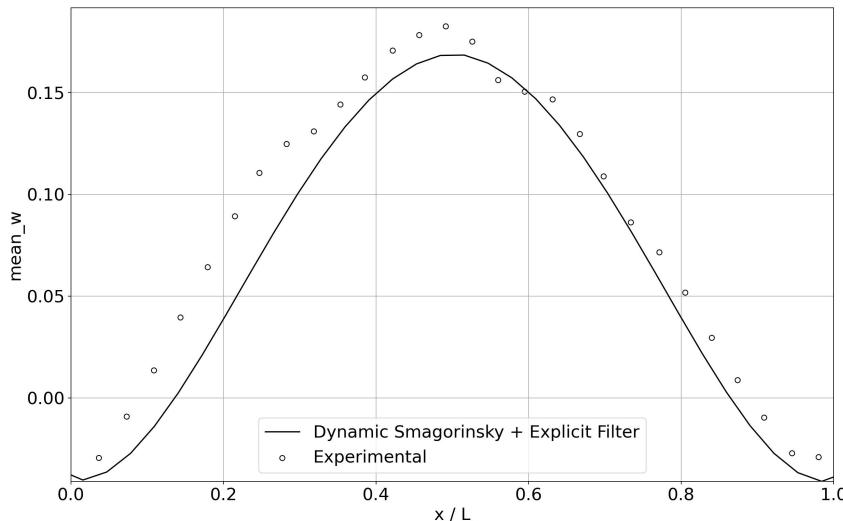
Fonte: Próprio autor.

4.1.4 RESULTADOS

Nesta seção é apresentado os resultados obtidos através do modelo computacional proposto na seção anterior. Os dados para análise estatística foram coletados a partir do tempo físico de 150 s.

Na Figura 4.7 tem-se o resultado obtido da velocidade média do campo euleriano comparado com o resultado do experimento material de [4]. O resultado obtido foi satisfatório.

Figura 4.7: Velocidade média do campo euleriano comparado com o resultado do experimento material de [4].



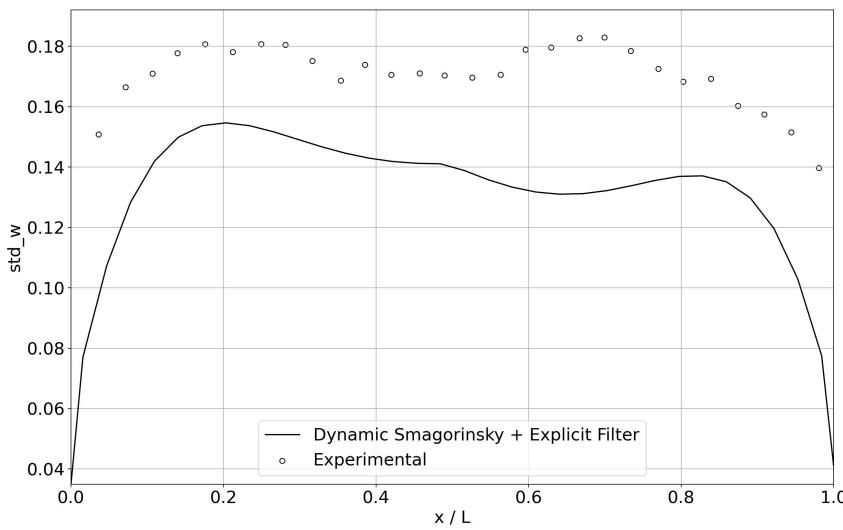
Fonte: Próprio autor.

Na Figura 4.8 tem-se o desvio padrão do campo da flutuação da velocidade euleriana na direção x, comparado com o resultado do experimento material de [4]. O resultado obtido subestima os valores de referência.

Na Figura 4.9 tem-se o desvio padrão do campo da flutuação da velocidade euleriana na direção x, comparado com o resultado do experimento material de [4]. Os resultados estão de acordo com o experimento material, exceto por um afastamento entre 0,2 a 0,6 de x/L.

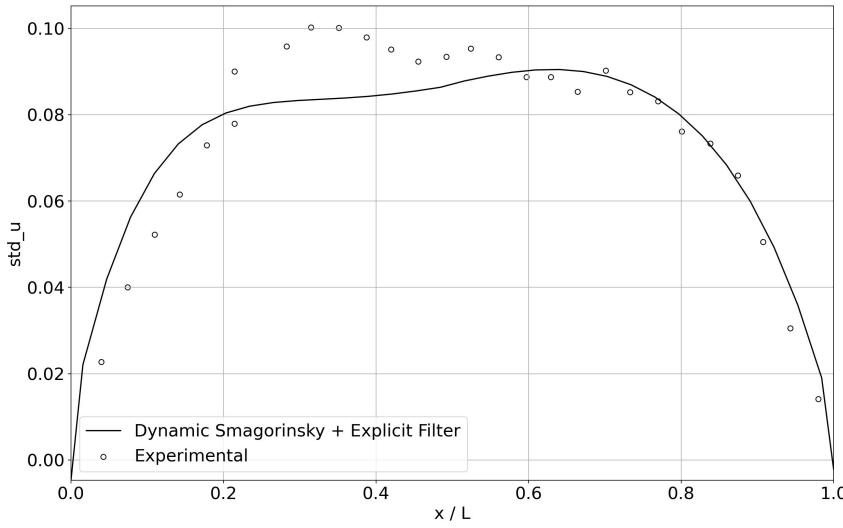
Na Figura 4.10 tem-se a energia cinética turbulenta do campo de flutuação de velocidade, comparado com o resultado do experimento material de [4]. Tem-se que os resultados obtidos via simulação computacional subestimaram os resultados obtidos no experimento material.

Figura 4.8: Desvio padrão do campo da flutuação da velocidade euleriana na direção z, comparado com o resultado do experimento material de [4].



Fonte: Próprio autor.

Figura 4.9: Desvio padrão do campo da flutuação da velocidade euleriana na direção x, comparado com o resultado do experimento material de [4].

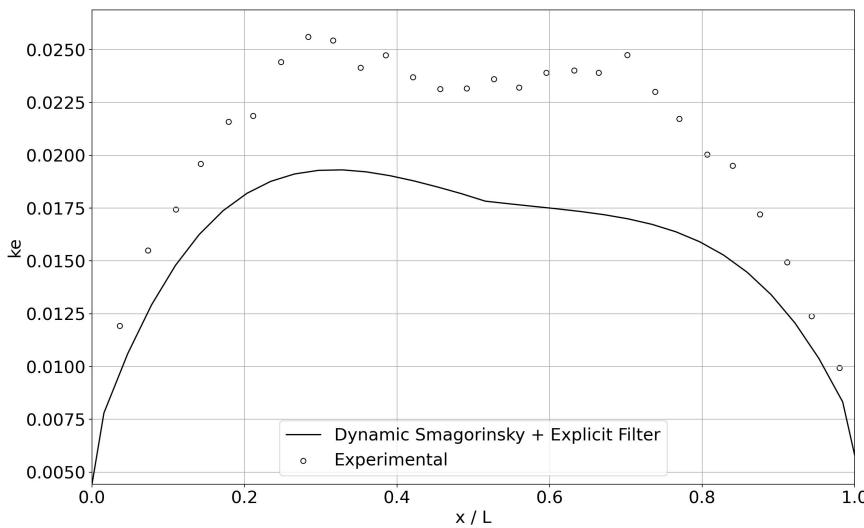


Fonte: Próprio autor.

4.1.5 CONCLUSÃO

Neste trabalho foi discorrido sobre experimento material realizado por [4], da injeção de bolhas na parte inferior de um reservatório vertical preenchido com água. Posteriormente foi detalhado o modelo matemático desenvolvido por [2], para formulação de 3 vias. É apresentado os resultados obtidos por [2], variando a constante de Smagorinsky e utilizando o modelo de

Figura 4.10: Energia cinética turbulenta do campo de flutuação de velocidade euleriana, comparado com o resultado do experimento material de [4].



Fonte: Próprio autor.

Germano-Lilly.

Apresentou-se os resultados obtidos para o modelo de fechamento da turbulência de Smagorinsky dinâmico em conjunto com um filtro explícito. O resultado para a velocidade média do campo euleriano foi satisfatório. O restante das variáveis comparadas apresentaram um distanciamento dos resultados obtidos por [4].

Para trabalhos futuros pretende-se realizar as simulações realizadas por [2] para comparação de resultados. E posteriormente, o refinamento desses resultados.

4.2 QUEIMADOR DE SPRAY COM AGULHA PILOTADA DE SYDNEY

Tabela 4.6: Comparativo de grandezas características de Kolmogorov e Taylor

Grandeza Característica	(l)	Valor (l)	(g)	Valor (g)
Comprimento (Kolmogorov)	η_l (m)	1.32×10^{-6}	η_g (m)	4.20×10^{-6}
Comprimento (Taylor)	λ_l (m)	5.98×10^{-4}	λ_g (m)	5.24×10^{-3}
Tempo (Kolmogorov)	τ_l (s)	2.33×10^{-4}	τ_g (s)	8.41×10^{-5}
Tempo (Taylor)	τ_L (s)	2.33×10^{-4}	τ_G (s)	1.09×10^{-4}
Velocidade (Kolmogorov)	$v_{r,l}$ (m/s)	3.20×10^{-1}	$v_{r,g}$ (m/s)	$3.59 \times 10^{+0}$

Tabela 4.7: Análise de Malha

Domínio		Comprimento de Malha			
Métrica	Base (m)	Base Taylor $\times 0,5$	Base Taylor	Base Taylor $\times 2,5$	Kolmogorov
Tamanho da Célula [min(L,g)]	-	0,000299	0,000598	0,001495	$1,32 \times 10^{-6}$
Células em x	0,0125	41,8	20,9	8,4	9440,9
Células em y	0,0125	41,8	20,9	8,4	9440,9
Células em z	0,05	167,3	83,6	33,5	37763,5
Total de Células		$2,92 \times 10^5$	36555,3	2339,5	$3,37 \times 10^{12}$

5. RESULTADOS

6. CONCLUSÕES

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] Capecelatro, J. e Desjardins, O.: *An Euler–Lagrange strategy for simulating particle-laden flows*. Journal of Computational Physics, 238:1–31, 2013, ISSN 0021-9991. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999112007462>.
- [2] Catta Preta, R. T. O.: *Modelagem matemática e computacional de escoamentos turbulentos bifásicos em regime denso*. Tese de Doutoramento, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, Brasil, 2023. <https://repositorio.ufu.br/handle/123456789/38810>.
- [3] Deen, N., Hjertager, B. e Solberg, T.: *Comparison of PIV and LDA Measurement Methods Applied to the Gas-Liquid Flow in a Bubble Column*. jul. 2000.
- [4] Deen, N., Solberg, T. e Hjertager, B.: *Large eddy simulation of the Gas–Liquid flow in a square cross-sectioned bubble column*. Chemical Engineering Science, 56(21):6341–6349, 2001, ISSN 0009-2509. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0009250901002494>, Proceedings of the 5th International Conference on Gas-Liquid and Gas-Liquid-Solid Reactor Engineering.
- [5] Evrard, F., Denner, F. e van Wachem, B.: *A multi-scale approach to simulate atomisation processes*. International Journal of Multiphase Flow, 119:194–216, 2019, ISSN 0301-9322. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S030193221830764X>.
- [6] Gidaspow, D.: *Multiphase flow and fluidization: continuum and kinetic theory descriptions*. Academic press, 1994.
- [7] Kishimoto, A., Moriai, H., Takenaka, K., Nishiie, T., Adachi, M., Ogawara, A. e Kurose, R.: *Application of a Nonadiabatic Flamelet/Progress-Variable Approach to Large-Eddy Simulation of H₂/O₂ Combustion Under a Pressurized Condition*. Journal of Heat Transfer, 139(12):124501, ago. 2017, ISSN 0022-1481. <https://doi.org/10.1115/1.4037099>.
- [8] Ku, X., Li, T. e Løvås, T.: *Influence of drag force correlations on periodic fluidization behavior in Eulerian–Lagrangian simulation of a bubbling fluidized bed*. Chemical Engineering Science, 95:94–106, 2013, ISSN 0009-2509. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0009250913002200>.
- [9] Ku, X., Li, T. e Løvås, T.: *CFD–DEM simulation of biomass gasification with steam in a fluidized bed reactor*. Chemical Engineering Science, 122:270–283, 2015, ISSN 0009-2509. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0009250914004709>.

- [10] Kumar, M. e Ghoniem, A.: *Multiphysics Simulations of Entrained Flow Gasification. Part II: Constructing and Validating the Overall Model.* Energy Fuels, 26:464–479, dez. 2011.
- [11] Lowe, A., Thomas, L. M., Satija, A., Lucht, R. P. e Masri, A. R.: *Five kHz thermometry in turbulent spray flames using chirped-probe-pulse femtosecond CARS, part II: Structure of reaction zones.* Combustion and Flame, 200:417–432, 2019, ISSN 0010-2180. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0010218018304681>.
- [12] Moriai, H., Kurose, R., Watanabe, H., Yano, Y., Akamatsu, F. e Komori, S.: *Large-eddy simulation of turbulent spray combustion in a subscale aircraft jet engine combustor-predictions of no and soot concentrations.* Journal of Engineering for Gas Turbines and Power, 135(9), 2013. <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-84881299545&doi=10.1115%2f1.4024868&partnerID=40&md5=7a563eb8647ed536e3984f01f3592e45>, Cited by: 54.
- [13] Song, T., Wu, J., Shen, L. e Xiao, J.: *Experimental investigation on hydrogen production from biomass gasification in interconnected fluidized beds.* Biomass and Bioenergy, 36:258–267, 2012, ISSN 0961-9534. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0961953411005368>.
- [14] Tachibana, S., Saito, K., Yamamoto, T., Makida, M., Kitano, T. e Kurose, R.: *Experimental and numerical investigation of thermo-acoustic instability in a liquid-fuel aero-engine combustor at elevated pressure: Validity of large-eddy simulation of spray combustion.* Combustion and Flame, 162(6):2621–2637, 2015, ISSN 0010-2180. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0010218015000991>.
- [15] Thomas, L. M., Lowe, A., Satija, A., Masri, A. R. e Lucht, R. P.: *Five kHz thermometry in turbulent spray flames using chirped-probe pulse femtosecond CARS, part I: Processing and interference analysis.* Combustion and Flame, 200:405–416, 2019, ISSN 0010-2180. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0010218018304796>.
- [16] Tsuji, Y., Tanaka, T. e Ishida, T.: *Lagrangian numerical simulation of plug flow of cohesionless particles in a horizontal pipe.* Powder Technology, 71(3):239–250, 1992, ISSN 0032-5910. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/003259109288030L>.
- [17] Wen, J., Hu, Y., Nishiie, T., Iino, J., Masri, A. e Kurose, R.: *A flamelet LES of turbulent dense spray flame using a detailed high-resolution VOF simulation of liquid fuel atomization.* Combustion and Flame, 237:111742, 2022, ISSN 0010-2180. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0010218021004855>.
- [18] Yang, M., Zhang, J., Zhong, S., Lia, T., Løvås, T., Fatehi, H. e Bai, X. S.: *CFD modeling of biomass combustion and gasification in fluidized bed reactors using a distribution kernel method.* Combustion and Flame, 236:111744, fev. 2022.